



رویکرد عددی به روش شبه طیفی و برازشی برای بررسی معادله شرودینگر و محاسبه ترازهای انرژی پتانسیل‌های تخت

وحید میرزایی محمودآبادی*

دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، صندوق پستی ۷۶۱۷۵

پست الکترونیکی: vah_mirzaei@uk.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۰۶/۱۵؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۱/۰۵/۰۵)

چکیده

در این مقاله پتانسیل‌های تخت $(\mu |x.a|^N)$ به صورت عددی به روش شبه طیفی بررسی شده اند. معادله شرودینگر این نوع پتانسیل با استفاده از روش شبه طیفی به یک ویژه سامانه تبدیل شده است. سپس ویژه سامانه با روش انطباق (Matching method) قطری شده است. ویژه مقادیر انرژی به ازای N های مختلف با مقالات مشابه مقایسه شده‌اند. رفتار حدی این پتانسیل به ازای حالت‌های $N=2$ و $N \rightarrow \infty$ که به ترتیب مربوط به نوسانگر هماهنگ ساده و ذره در جعبه با طول $2a$ است بررسی شده است. به ازای هر N ، یک تابعیت برای ویژه مقادیر انرژی برحسب عدد کوانتومی n پیشنهاد شده است. به کمک برازش داده‌ها، میزان درستی معادله پیشنهادی بررسی شده است

واژه‌های کلیدی: روش شبه طیفی، پتانسیل‌های تخت، ویژه مقدار انرژی، روش ژاکوبی

۱. مقدمه

مجبور به استفاده از روش‌های تقریب و یا روش‌های عددی هستیم. در دهه‌های گذشته، تلاش زیادی برای حل این معادله صورت گرفته است [۴-۶]. پتانسیل‌های شعاعی از جمله پتانسیل‌های معروفی هستند که در گرایش‌های مختلف فیزیک از جمله هسته‌ای، اتمی مولکولی، حالت جامد و... کاربرد فراوانی دارند و پدیده‌های مختلفی را کشف و بررسی می‌کنند [۷]. اغلب این پتانسیل‌ها نیز حل تحلیلی ندارند.

یکی از روش‌های عددی دارای دقت بالا برای حل معادله شرودینگر، روش‌های شبه طیفی است. این روش‌ها مبتنی بر استفاده از توابع کامل متعامد برای تشکیل یک ویژه سامانه به

یکی از مسائل مهم در مکانیک کوانتومی حل معادله شرودینگر به ازای پتانسیل‌های مختلف فیزیکی است. با حل این معادله و به دست آوردن توابع موج و ویژه مقادیر انرژی، مسائل بسیاری را می‌توان حل کرد. حل این معادله برای پتانسیل‌های پرکاربردی از جمله پتانسیل نوسانگر هماهنگ ساده، ذره در جعبه و یا پتانسیل کولنی از اهمیت زیادی برخوردار بوده است [۱-۳]. این معادله به ازای برخی از پتانسیل‌های خاص حل تحلیلی دارد اما پتانسیل‌های زیادی در حوزه‌های مختلف فیزیکی وجود دارد که برای آنها این معادله حل تحلیلی ندارد و

بررسی هسته‌های تغییر شکل یافته [۱۹] اشاره کرد. همچنین این پتانسیل در فیزیک مولکولی قابل بررسی است [۲۰].
به ازای $N=8$ که ترکیب خطی توان‌های کوچک‌تر مساوی هشت از مکان را شامل می‌شود پتانسیل مرتبه هشت^۳ گفته می‌شود. حل این پتانسیل به جز مواردی خاص انجام نشده است. با این حال به تازگی با توجه به علاقه بسیار به نظریه میدان ابعاد پائین^۴، حل این پتانسیل در فضای دو بعدی اهمیت پیدا کرده است [۲۱].

یکی از نکات مهم در باره شکل کلی پتانسیل این است که به ازای N های بزرگ، این پتانسیل تبدیل به پتانسیل چاه بی-نهایت و یا همان ذره در جعبه به عرض $2a$ می‌شود [۲ و ۳].
ترکیب خطی توان‌های مختلف این پتانسیل نیز در مسائل متعددی اهمیت پیدا کرده است. با بررسی این پتانسیل به ازای N های مختلف می‌توان نشان داد که چگونه ویژه مقادیر حالت پایه به صورت یک منحنی منظم به چاه بی‌نهایت همگرا می‌شود. معادله شرودینگر به ازای $N > 2$ حل تحلیلی ندارد. بنابراین محققان به روش‌های گوناگون غیر تحلیلی سعی در حل معادله شرودینگر این دسته از پتانسیل‌ها را داشته‌اند [۱۰، ۱۵ و ۱۶].
در این تحقیق چند توان اول این نوع پتانسیل به ازای $N=2$ ، ۱۱، ... به صورت عددی مورد بررسی قرار گرفته است. سعی شده است تا به وسیله برازش داده‌های حاصل از حل عددی معادله شرودینگر معادله‌ای برای ویژه مقادیر انرژی به دست آید.

۲. روش شبه طیفی

روش‌های طیفی بر مبنای نمایش یک تابع حقیقی، پیوسته و خوش رفتار $f(x)$ در یک بازه محدود برحسب بسط توابع راست‌هنجار P_n است که

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n P_n(x), \quad x \in [a, b], \quad (3)$$

و چند جمله‌ای‌های راست‌هنجار P_n در رابطه تعامد صدق

عنوان تخمینی از معادله شرودینگر است. دقت هر دسته از توابع کامل متعامد در حل معادله شرودینگر به بازه تعریف شده مختصه فضایی پتانسیل وابسته است. برای پتانسیل‌های شعاعی مانند مسئله اتم هیدروژن که حوزه فضایی مورد بررسی $(0, \infty)$ است استفاده از توابع لاگر مناسب است. برای مسئله نوسانگر که حوزه فضایی مورد بررسی $(-\infty, \infty)$ است استفاده از توابع هرمیت جواب‌های دقیق‌تری می‌دهد. در این مطالعه، از توابع سینوسی به عنوان پایه‌های کامل متعامد استفاده شده است. در مرجع [۸] روابط لازم به طور مفصل داده شده است.

پتانسیل‌های مورد بررسی در این مقاله، از نوع $\mu |x.a|^N$ هستند که در واقع دسته‌ای از پتانسیل‌های گوناگون به ازای توان‌های مختلف N است [۹ و ۱۰]. شکل کلی این پتانسیل به صورت

$$V(x) = \mu |x/a|^N, \quad N = 2, 3, \dots, \quad (1)$$

است که μ و a ثابت‌اند و N یک عدد صحیح مثبت بزرگ‌تر از یک است. این پتانسیل به ازای N های مختلف قابل بررسی است و در موارد متعددی کاربرد دارد [۱-۳ و ۱۱]. از جمله کاربردهای کلی این پتانسیل می‌توان به انتقال فاز ساختاری [۱۲] و مواد جامد در تشکیل پلارون [۱۳] اشاره کرد.

به ازای بعضی از توان‌های خاص N ، این پتانسیل کاربردهای ویژه‌ای در برخی زمینه‌ها دارد. به ازای $N=2$ این پتانسیل، پتانسیل آشنای نوسانگر ساده است و ویژه مقادیر انرژی به صورت

$$E_n = h\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2)$$

دارد [۱۴].

به ازای $N=4$ به این پتانسیل، هارمونیک مرتبه چهار^۱ گفته می‌شود [۱۰، ۱۵ و ۱۶]. از جمله کاربردهای این پتانسیل در مکانیک کوانتومی غیر نسبیستی است [۱۷]. به ازای $N=6$ پتانسیل‌ها شامل ترکیب خطی توان‌های مکان تا شش است. این را پتانسیل مرتبه شش^۲ می‌گویند. از جمله کاربردهای این پتانسیل می‌توان به استفاده از آن در فیبرهای اپتیکی [۱۸] و

۳. Octic potential

۴. Lower-dimensional filed theory

۱. Quadratic harmonic potential

۲. Sextic potential

می‌کنند.

$$\int_a^b w(x) P_n(x) P_m(x) dx = \delta_{(n,m)}, \quad (4)$$

$w(x)$ تابع وزنی مناسب و $\delta_{n,m}$ تابع دلتای کرونیگر است. اما اصطلاح "شبه طیفی" به حل معادلات تعیین کننده در شبکه‌ای از نقاط گسسته، $\{x_i\}$ و حل $f(x_i)$ همان طور که در نقاط شبکه تعیین می‌شود، اشاره دارد.

روش‌های شبه طیفی توسط مسئله ویژه مقاداری

$$\int_a^b k(x, y) \psi_n(y) dy = \lambda_n \psi_n(x), \quad (5)$$

بیان می‌شود که در آن عملگر انتگرال در سمت چپ توسط هسته، $k(x, y)$ تعریف می‌شود و فرض می‌شود که نسبت به هر دو متغیر مستقل x و y خوش رفتار است. معادله انتگرالی (۵) با استفاده از مربع‌بندی^۲ مناسب به مجموعه‌ای از معادلات خطی کاهش می‌یابد. در روش شبه طیفی از تقریب

$$\int_a^b w(x) F(x) dx \approx \sum_{i=1}^{i=N} w_i F(x_i), \quad (6)$$

برای تخمین انتگرال استفاده می‌شود که مجموعه مربع‌بندی $\{x_i\}$ ریشه‌های $P_N(x_i)=0$ و $\{w_i\}$ مجموعه مربع‌بندی متناظر است و P_N مجموعه‌ای از توابع راست‌هنجار است. بنابراین معادله (۵) در روش شبه طیفی به صورت

$$\sum_{i=1}^{i=N} w_i k(x_j, x_i) \psi_n(x_i) = \lambda_n \psi_n(x_j), \quad (7)$$

نوشته می‌شود.

اکنون یک سامانه کوانتومی یک بعدی تابع x در بازه (a, b)

در نظر گرفته می‌شود. عملگر انرژی جنبشی عبارت خواهد بود از

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad (8)$$

با این فرض که توابع موج در حدود بازه انتخاب شده صفر می‌شوند باید مجموعه $\{x_i\}$ را با توجه به مجموعه P_N راست-هنجار انتخاب شده تعیین کرد. یکی از انتخاب‌ها استفاده از

توابع راست‌هنجار سینوسی است. مزیت این انتخاب مشخص بودن ریشه‌های P_N به صورت پارامتری و نامحدود و نیز هم‌فاصله بودن آنها است. ریشه‌های این

$$x_i = a + \frac{(b-a)i}{N}, \quad i = 1, \dots, N-1$$

$$x_i = a + \frac{(b-a)i}{N}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (9)$$

توابع راست‌هنجار متناظر عبارت است از:

$$\phi_n(x) = \left(\frac{r}{b-a} \right)^r \sin \frac{n\pi(x-a)}{b-a}, \quad n = 1, \dots, N-1, \quad (10)$$

که توابع در دو نقطه مرزی a و b صفر هستند. با این انتخاب، انرژی جنبشی به صورت

$$T_{ii'} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta x \sum_{n=1}^{N-1} \phi_n(x_i) \phi_n''(x_{i'}) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{b-a} \right)^2 \frac{2}{N} \sum_{n=1}^{N-1} n^2 \sin \frac{n\pi i}{N} \sin \frac{n\pi i'}{N}, \quad \Delta x = \frac{b-a}{N} \quad (11)$$

درمی‌آید [۲۲]. پس از انجام برخی محاسبات، معادله (۱۱) را به صورت تحلیلی می‌توان تعیین کرد [۲۲]

$$T_{ii'} = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{b-a} \right)^2 \frac{1}{r} \frac{\sin^2 \left[\frac{\pi(i-i')}{rN} \right]}{\sin^2 \left[\frac{\pi(i+i')}{rN} \right]}, & i \neq i' \\ \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{b-a} \right)^2 \frac{1}{r} \frac{rN^2 + 1}{\sin^2 \left[\frac{\pi i}{N} \right]}, & i = i' \end{cases}, \quad (12)$$

در دسته پتانسیل $+$ که a, b از دو طرف به بی‌نهایت میل می‌کنند، با میل دادن این دو حد بازه به ترتیب به منفی و مثبت بی‌نهایت، هامیلتونی مربوط به یک شبکه یکنواخت به صورت یک دستگاه ماتریسی به شکل

$$H_{ii'} = \left. \begin{cases} \frac{\pi^2}{2m \Delta x^2}, & i = i' \\ \frac{(-1)^{i-i'}}{2m \Delta x^2} \frac{1}{(i-i')^2}, & i \neq i' \end{cases} \right\} + \delta_{ii'} V(x_i), \quad (13)$$

۱. Kernel

۲. Quadrature

۳. مقایسه نتایج عددی با جواب‌های تحلیلی برای

نوسانگر هماهنگ ساده

برای بررسی میزان دقت و درستی جواب‌های حاصل از روش عددی مورد استفاده در مورد خاص نوسانگر هماهنگ ساده، جواب‌ها با نتایج تحلیلی مقایسه می‌شود. پتانسیل مورد بررسی به صورت معادله (۱) است. به ازای $N=2$ و با $\hbar=m=1$ معادله شرودینگر و ویژه مقادیر تحلیلی انرژی به ترتیب به صورت

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 U}{dx^2} + x^2 U(x) = EU(x), \quad (15)$$

$$E_n = \sqrt{2} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (16)$$

است که $\mu=a=1$ فرض شده است. برای محاسبه ویژه مقادیر و ویژه توابع دسته پتانسیل معادله (۱) به روش شبه طیفی، برنامه-ای به زبان فرترن تهیه شده است. با توجه به متقارن بودن پتانسیل، معادله شرودینگر در بازه -7 تا 7 حل شده است. تعداد بازه‌های انتخاب شده 1000 قسمت بوده است. زمان اجرای برنامه برای چنین قسمت‌بندی به وسیله رایانه‌ای با مشخصات Processor: Intel® Pentium® CPU P6200 @ 2.13 GHz، یک دقیقه و پنجاه و سه ثانیه است.

برنامه نوشته شده در پیوند

<https://drive.google.com/drive/folders/1hecLI0hN76saPJQnKfA8AVmGmLmHqv1U6?usp=sharing>

قابل دسترسی است.

در جدول ۱ طبق معادله (۱۶)، ویژه مقادیر دقیق انرژی نوسانگر هماهنگ ساده برحسب عدد کوانتومی n آورده شده است.

در جدول ۲ تعداد هشت ویژه مقدار انرژی محاسبه شده به صورت عددی به ازای $N=2, \dots, 11$ آورده شده است.

همان طور که از مقایسه بین جدول ۱ و ستون اول جدول ۲ پیدا است، تطابق بسیار خوبی بین مقادیر تحلیلی و عددی مشاهده می‌شود. برای $N > 2$ بعضی از ویژه مقادیر انرژی در برخی مقالات با روش‌های مختلف محاسبه و گزارش شده‌اند.

در مرجع [۲۳] انرژی حالت پایه برای $N=4$ با دقت بالا

$$E_{g,s} = 0/667986259155777 \dots$$

جدول ۱. ویژه مقادیر دقیق انرژی نوسانگر.

n	E
۰	$\frac{1}{2} \sqrt{2} = 0/707106781186$
۱	$\frac{3}{2} \sqrt{2} = 2/121320343559$
۲	$\frac{5}{2} \sqrt{2} = 3/535533905932$
۳	$\frac{7}{2} \sqrt{2} = 4/949747468305$
۴	$\frac{9}{2} \sqrt{2} = 6/36910306789$
۵	$\frac{11}{2} \sqrt{2} = 7/778174593052$
۶	$\frac{13}{2} \sqrt{2} = 9/192388155425$
۷	$\frac{15}{2} \sqrt{2} = 10/60660171780$

تخمین زده می‌شود. جمله اول نماینده عملگر انرژی جنبشی و جمله دوم نماینده انرژی پتانسیل است و $\Delta x = x_i - x_{i-1}$ در این روش عددی پس از تشکیل عناصر ماتریسی H_{ii} ، ویژه مقادیر این ماتریس به صورت عددی محاسبه و انرژی‌های مربوطه به دست می‌آید. به عنوان مثال ساده‌ای از این فرمول می‌توان به پتانسیل نوسانگر هماهنگ ساده اشاره کرد [۲۲].

$$H_{ii'} = \frac{(-1)^{i-i'}}{2\Delta x^2} \begin{cases} \frac{\pi^2}{2}, & i = i' \\ \frac{1}{(i-i')^2}, & i \neq i' \end{cases} + \delta_{ii'} \frac{x_i^2}{2}, \quad (14)$$

که $\hbar=m=1$ فرض شده است. در مرجع [۲۲] در مورد حالت-های گوناگون کاربرد این روش در حل معادله شرودینگر برای انواع پتانسیل‌ها در بازه $(-\infty, \infty)$ مانند پتانسیل نوسانگر ساده، $(0, \infty)$ مانند مسئله اتم هیدروژن و... توضیحات مفصل داده شده است. به عبارت دیگر شکل معادله (۱۳) برای پتانسیل‌های متقارن در محاسبات عددی حل معادله شرودینگر دقت مناسبی دارد و اگر پتانسیل مانند مسئله اتم هیدروژن (قسمت شعاعی معادله شرودینگر) شامل بازه نیمه بی‌نهایت باشد شکل این معادله متفاوت خواهد بود.

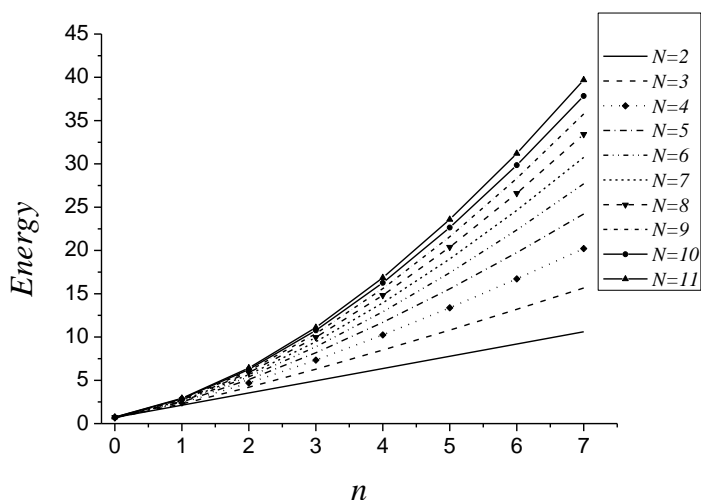
جدول ۲. هشت ویژه مقادیر اول انرژی به ازای $N=2...11$ در پتانسیل معادله (۲).

	$N=2$	$N=3$	$N=4$	$N=5$	$N=6$
E_0	۰/۷۰۷۱۰۶۷۸۱۱۸۶	۰/۶۷۴۸۹۳۹۰۷۷۹۵	۰/۶۶۷۹۸۶۲۵۹۱۵۵	۰/۶۷۱۸۵۷۸۲۹۷۵۸	۰/۶۸۰۷۰۳۶۱۱۶۶۴
E_1	۲/۱۲۱۳۲۰۳۴۳۵۵۹	۲/۲۷۶۵۲۲۳۸۳۰۰۲	۲/۳۹۳۶۴۴۰۱۶۴۸۳	۲/۴۹۲۳۷۰۵۱۹۵۳۷	۲/۵۷۹۷۴۶۲۲۸۴۳۷
E_2	۳/۵۳۵۵۳۳۹۰۵۹۳۲	۴/۲۰۲۸۲۶۱۴۷۲۸۹	۴/۶۹۶۷۹۵۳۸۶۸۶۳	۵/۰۸۱۸۷۰۰۵۸۷۱۷	۵/۳۹۴۸۸۸۳۵۷۴۳۴
E_3	۴/۹۴۹۷۴۷۴۶۸۳۰۶	۶/۲۸۲۲۲۷۶۱۱۶۸۷	۷/۳۳۵۷۲۹۹۹۵۲۲۷	۸/۱۸۳۹۰۴۸۵۳۳۹۸	۸/۸۱۰۵۰۴۹۹۹۶۸۰۳
E_4	۶/۳۶۳۹۶۱۰۳۰۶۷۹	۸/۴۹۱۲۲۹۱۱۸۷۱۴	۱۰/۲۴۴۳۰۸۴۵۵۴۴	۱۱/۶۹۶۱۲۲۵۹۸۰۴	۱۲/۹۱۱۳۲۰۰۰۸۲۱
E_5	۷/۷۷۸۱۷۴۵۹۳۰۵۱	۱۰/۷۹۹۷۵۸۲۸۹۶۴	۱۳/۳۷۹۳۳۶۵۵۲۶۰	۱۵/۵۶۴۲۰۳۶۴۸۷۶	۱۷/۴۲۱۶۳۷۰۷۹۱
E_6	۹/۱۹۲۳۸۱۱۵۵۴۲۴	۱۳/۱۹۵۶۵۹۰۲۳۶۹	۱۶/۷۱۱۸۱۹۶۳۲۹۲	۱۹/۷۴۸۲۲۵۱۶۶۸۲	۲۲/۳۶۴۸۷۵۰۷۷۷۱
E_7	۱۰/۶۰۶۶۰۱۷۱۷۸۰	۱۵/۶۶۶۱۶۸۷۰۳۱۳	۲۰/۲۲۰۸۴۹۴۶۴۰۷	۲۴/۲۱۹۱۷۷۷۵۱۰۹	۲۷/۷۰۵۶۷۸۴۸۹۸۳

	$N=7$	$N=8$	$N=9$	$N=10$	$N=11$
E_0	۰/۶۹۱۸۷۳۸۴۵۷۱۱	۰/۷۰۴۰۴۸۷۷۴۱۲۳	۰/۷۱۶۵۳۳۶۳۹۰۰۵	۰/۷۲۸۹۵۱۳۸۰۳۴۹	۰/۷۴۱۰۹۵۹۷۰۳۲۰
E_1	۲/۶۵۸۹۰۶۱۲۱۳۴۱	۲/۷۳۱۵۳۲۵۵۷۹۴۴	۲/۷۹۸۶۷۹۰۱۰۵۸۰	۲/۸۶۱۰۸۶۴۶۵۴۹۹	۲/۹۱۹۳۱۹۷۶۷۶۱۹
E_2	۵/۶۵۷۷۷۵۹۰۴۶۷۲	۵/۸۸۴۱۷۶۸۶۹۸۹۲	۶/۰۸۲۹۶۴۰۵۱۳۸۷	۶/۲۶۰۱۴۹۴۲۸۳۴۴	۶/۴۱۹۹۶۱۱۵۷۳۴۴
E_3	۹/۴۶۳۸۰۹۰۷۰۹۲۶	۹/۹۶۰۹۸۸۳۱۱۱۸۹	۱۰/۳۹۱۴۷۶۱۴۳۷۲	۱۰/۷۶۹۳۵۵۲۴۱۱۴	۱۱/۱۰۴۹۹۲۶۷۱۸۸
E_4	۱۳/۹۴۰۷۶۶۶۷۲۷۸	۱۴/۸۲۳۳۸۱۷۹۹۶۶	۱۵/۵۸۸۰۰۵۷۱۱۳۳	۱۶/۲۵۹۶۸۶۲۱۵۰۴	۱۶/۸۵۳۴۴۴۹۷۴۰۷
E_5	۱۹/۰۱۲۹۵۳۹۲۴۷۲	۲۰/۳۸۸۱۸۱۹۸۱۶۷	۲۱/۵۸۷۲۲۷۷۹۵۸۰	۲۲/۶۴۱۵۲۷۳۸۱۳۶	۲۳/۵۷۵۹۷۰۳۸۷۷۸
E_6	۲۴/۶۲۸۷۵۵۳۵۴۰۳	۲۶/۵۹۹۷۰۱۶۴۱۵۰	۲۸/۳۲۷۶۳۰۱۹۱۰۶	۲۹/۸۵۳۱۷۲۲۴۵۰۸	۳۱/۲۰۹۱۷۲۴۹۳۱
E_7	۳۰/۷۴۸۶۱۲۷۶۱۹۸	۳۳/۴۱۵۴۳۴۰۹۵۷۵	۳۵/۷۶۵۴۲۱۰۰۳۰۹	۳۷/۸۴۸۴۱۷۴۳۸۱۵	۳۹/۷۰۵۶۲۰۴۹۹۸۹

ارائه شده است. مقدار محاسبه شده انرژی حالت پایه $N=4$ در این کار تحقیقی که در جدول ۲ ارائه شده است تا دوازده رقم اعشار برابر مقدار گزارش شده در [۲۳] است. البته باید به این نکته اشاره کرد که در این روش دقت ویژه مقادیر انرژی محاسبه شده با دور شدن از حالت پایه به تدریج کم می شود. محاسبات نشان می دهد در a های کوچک انرژی، حالت پایه از مقدارهای بیشتر شروع می شود. با افزایش مقدار a ، به تدریج انرژی حالت پایه کاهش می یابد تا تقریباً به یک حالت مجانبی نزدیک می شود. شکل پتانسیل به ازای N های مختلف به وضوح نزدیک شدن شکل پتانسیل معادله (۱) به پتانسیل ذره در جعبه را نشان می دهد. رفتار توابع موج نیز به ازای N مختلف با افزایش این پارامتر به رفتار توابع موج ذره در جعبه نزدیک می شود. نتایج مربوط به محاسبات توابع موج حالت پایه نشان می دهد که با افزایش N ، شکل تابع

موج به شکل کسینوسی با نیم طول موج که تابع موج حالت پایه ذره در جعبه است نزدیک می شود. با افزایش توان در پتانسیل معادله (۱)، شکل تابع موج به تدریج جمع تر و تیزتر می شود. این نکته را به پتانسیل می توان نسبت داد؛ گسترش فضایی پتانسیل به ازای N های کوچک تر، بیشتر بوده و بنابراین تابع موج نیز گسترش فضایی بیشتری خواهد داشت و برعکس. این نکته برای توابع موج با انرژی بالاتر نیز برقرار است. در صورتی که ترازهای انرژی به ازای هر N رسم شود، بسته به مقدار N در پتانسیل معادله (۱) فاصله ترازهای متوالی متفاوت خواهد بود. به ازای $N=2$ که پتانسیل تبدیل به نوسانگر هماهنگ ساده می شود فاصله ترازها ثابت است. با افزایش پارامتر N مشاهده می شود که فاصله ترازها ثابت نیست و با دور شدن از حالت پایه، فاصله ترازها بیشتر و بیشتر می شود. میزان افزایش ترازهای متوالی به N وابسته است.



شکل ۱. منحنی ویژه مقادیر انرژی برحسب عدد کوانتومی n برای N مختلف.

شده برای چند N اول همراه با معیارهای آماری میزان صحت برازش، در جدول ۳ آورده شده است.

نتایج حاصل از برازش نشان می‌دهند که توان عدد کوانتومی n در معادله (۱۷) رفتار پیش بینی شده را دارند. به عبارت دیگر توان عدد کوانتومی n در حالت حدی نوسانگر ($N=2$) از مقدار ۱ به تدریج افزایش می‌یابد و به صورت مجانبی به ۲ میل می‌کند.

پارامتر β برحسب N در معادله (۱) به صورت

$$\beta(N) = a_0 + \frac{a_1}{N} + \frac{a_2}{N^2} + \frac{a_3}{N^3} + \frac{a_4}{N^4} + \frac{a_5}{N^5} + \frac{a_6}{N^6} + \frac{a_7}{N^7}, \quad (20)$$

در نظر گرفته شده و برازش بر اساس این معادله انجام شده است.

بهترین نتیجه برازش در فهرست معادله (۲۱) داده شده است.

$$\begin{cases} a_0 = 1/77069, \\ a_1 = -1/06246, \\ a_2 = -24/97384, \\ a_3 = 218/27254, \\ a_4 = -969/91007, \\ a_5 = 2476/78242, \\ a_6 = -3402/67652, \\ a_7 = 1933/65533. \end{cases} \quad (21)$$

در شکل ۱ منحنی انرژی برحسب n آورده شده است. به ازای $N=2$ براساس انتظار، ارتباط E با n خطی بوده و این منحنی رفتار خطی دارد. با افزایش N ، تابعیت انرژی برحسب عدد کوانتومی n از حالت خطی خارج می‌شود. در حد دیگر وقتی N به بی‌نهایت میل می‌کند (مسئله ذره در جعبه) می‌دانیم انرژی برحسب عدد کوانتومی n به صورت درجه دو است.

با توجه به شکل ۱ به نظر می‌رسد در حالات بینابینی دو حالت نوسانگر هماهنگ ساده ($N=2$) و ذره در جعبه ($N \rightarrow \infty$)، رفتار انرژی برحسب توان عدد کوانتومی n از ۱ برای نوسانگر هماهنگ ساده ($N=2$) تا ۲ برای ذره در جعبه ($N \rightarrow \infty$) تغییر کند. از این رو پیشنهاد می‌شود که ویژه مقادیر انرژی برحسب n شکلی به صورت

$$E_n = \alpha(N) \left(N^{\beta(N)} + \gamma(N) \right), \quad (17)$$

داشته باشند. برای نوسانگر هماهنگ ساده ($N=2$) به ازای $a=\mu=\hbar=m=1$ داریم:

$$\alpha = \sqrt{2}, \quad \beta = 1, \quad \gamma = \frac{1}{2}, \quad (18)$$

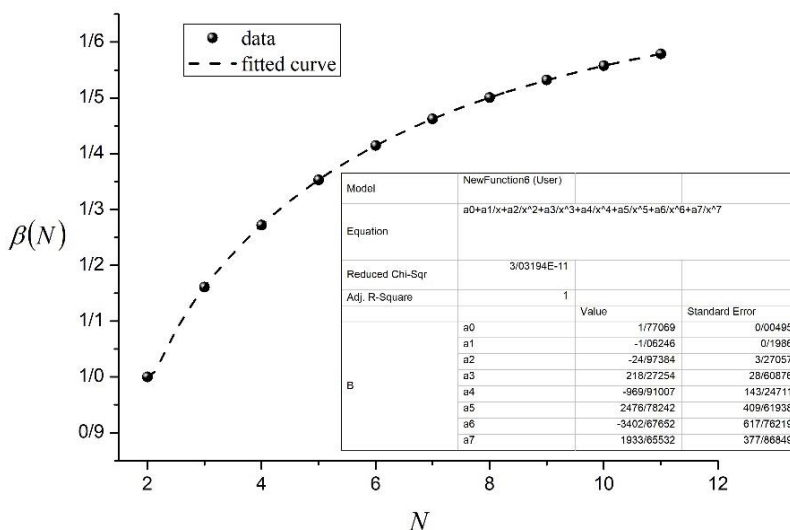
و نیز در حد دیگر که مربوط به ذره در جعبه ($N \rightarrow \infty$) است به ازای $a=\mu=\hbar=m=1$ داریم:

$$\alpha = \frac{\pi^2}{2}, \quad \beta = 2, \quad \gamma = 0, \quad (19)$$

براساس معادله پیشنهادی (۱۷)، داده‌های به دست آمده از روش عددی برای انرژی برازش شده است. نتایج برازش انجام

جدول ۳. رابطه ویژه مقدارهای انرژی برحسب عدد کوانتومی n به ازای چند مقدار N.

توان در پتانسیل	معادله ترازهای انرژی	مربع تعدیل شده	مربع کای کاهش یافته
N=۲	$E_n = 1/41421(x^{1/00000} + 0/50000)$	۱/۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰
N=۳	$E_n = 1/56301(x^{1/16072} + 0/44281)$	۰/۹۹۹۹۹	۰/۰۰۰۳۴
N=۴	$E_n = 1/63934(x^{1/27203} + 0/43185)$	۰/۹۹۹۹۷	۰/۰۰۰۱۴
N=۵	$E_n = 1/68442(x^{1/35312} + 0/43722)$	۰/۹۹۹۹۶	۰/۰۰۰۳۱۶
N=۶	$E_n = 1/71425(x^{1/41452} + 0/44936)$	۰/۹۹۹۹۴	۰/۰۰۰۵۵۱
N=۷	$E_n = 1/73577(x^{1/46244} + 0/46440)$	۰/۹۹۹۹۳	۰/۰۰۰۸۳۸
N=۸	$E_n = 1/75257(x^{1/50071} + 0/48051)$	۰/۹۹۹۹۱	۰/۰۰۱۱۶۹
N=۹	$E_n = 1/76659(x^{1/53185} + 0/49672)$	۰/۹۹۹۹۰	۰/۰۰۱۵۳۷
N=۱۰	$E_n = 1/77892(x^{1/55755} + 0/51252)$	۰/۹۹۹۸۹	۰/۰۰۱۹۳۵
N=۱۱	$E_n = 1/79025(x^{1/57901} + 0/52760)$	۰/۹۹۹۸۸	۰/۰۰۲۳۵۴

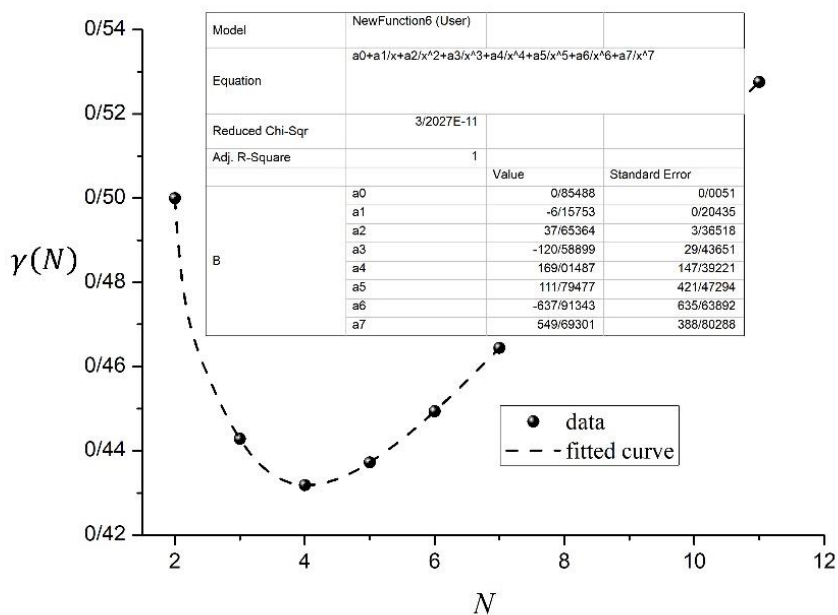


شکل ۲. منحنی توان عدد کوانتومی n برحسب پارامتر N در معادله (۱) و منحنی حاصل از برازش آن همراه با معیارهای آماری.

$$\gamma(N) = b_0 + \frac{b_1}{N} + \frac{b_2}{N^2} + \frac{b_3}{N^3} + \frac{b_4}{N^4} + \frac{b_5}{N^5} + \frac{b_6}{N^6} + \frac{b_7}{N^7}$$

(۲۲)

نتیجه برازش و معیارهای آماری در شکل ۲ آورده شده است. به طریق مشابه، پارامتر γ با تابعیتی مشابه β برحسب N طبق معادله (۲۰) با ثابت b_i مورد بررسی قرار گرفته شده است.



شکل ۳. منحنی γ برحسب پارامتر N در معادله (۱) و منحنی حاصل از برازش آن همراه با معیارهای آماری.

$$\begin{cases} c_0 = 2/1543, \\ c_1 = -9/75596, \\ c_2 = 114/91665, \\ c_3 = -120/45538, \\ c_4 = 3499/27405, \\ c_5 = -1642/14078, \\ c_6 = 11665/97488, \\ c_7 = -6537/97592. \end{cases} \quad (25)$$

در شکل ۴ نتایج برازش برای پارامتر α به عنوان تابعی از N در معادله (۱) با معیارهای آماری مربوط به میزان صحت برازش آورده شده است.

بنابر محاسبات انجام شده، ویژه مقادیر انرژی پتانسیل معادله (۱) به عنوان تابعی از N برحسب n یعنی $E_n(N)$ به صورت:

$$E_n(N) = \left(\begin{aligned} & \frac{2}{1543} - \frac{9}{75596} + \frac{114}{91665} + \\ & \frac{120}{45538} + \frac{3499}{27405} - \\ & \frac{1642}{14078} + \frac{11665}{97488} - \\ & \frac{6537}{97592} \end{aligned} \right)$$

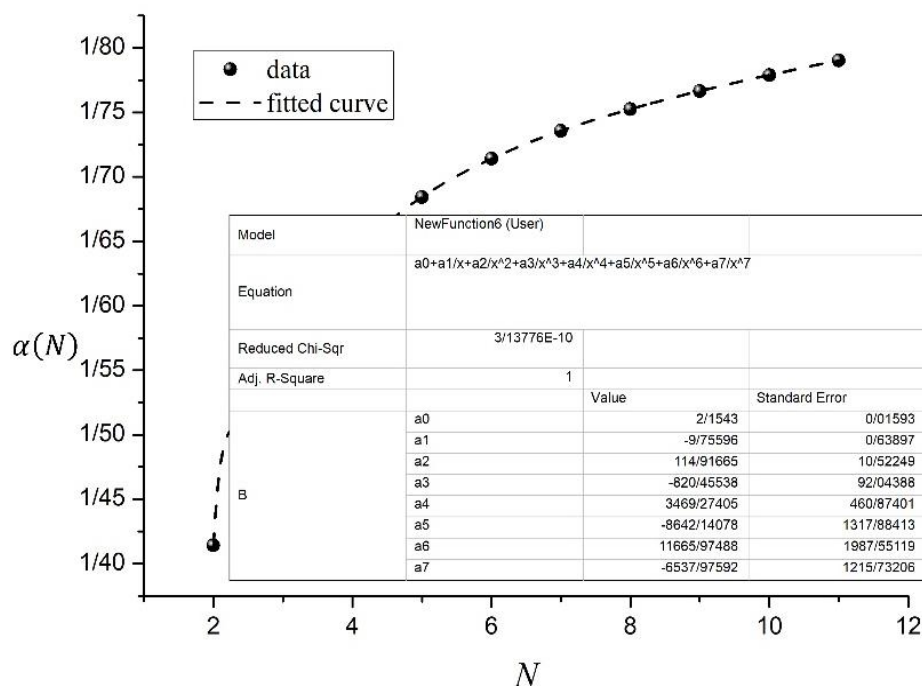
نتیجه برازش، منحنی داده‌ها، معیارهای آماری و ثابت‌ها در شکل ۳ و فهرست ضرایب نیز طبق معادله (۲۳) داده شده است.

$$\begin{cases} b_0 = 0/85488, \\ b_1 = -6/15753, \\ b_2 = 37/65364, \\ b_3 = -120/58899, \\ b_4 = 169/01487, \\ b_5 = 111/79477, \\ b_6 = -837/91343, \\ b_7 = 549/69301. \end{cases} \quad (23)$$

پارامتر α به عنوان تابعی از x در پتانسیل یعنی N در معادله (۱) با شکل تابعیت پیشنهادی معادله (۲۴) مورد بررسی قرار گرفته است.

$$\alpha(N) = c_0 + \frac{c_1}{N} + \frac{c_2}{N^2} + \frac{c_3}{N^3} + \frac{c_4}{N^4} + \frac{c_5}{N^5} + \frac{c_6}{N^6} + \frac{c_7}{N^7}, \quad (24)$$

نتایج برازش بر اساس معادلات جدول ۳ برای پارامتر α طبق معادله (۲۴)، در فهرست معادله (۲۵) داده شده است.



شکل ۴. منحنی α برحسب پارامتر N در معادله (۱) و منحنی حاصل از برازش آن همراه با معیارهای آماری.

مقادیر انرژی با عدد کوانتومی n را می‌دهد. این پیشنهاد براساس شکل معادله ویژه مقدار انرژی در دو حد ابتدایی و انتهایی پارامتر N در معادله (۱) ارائه شده است. در حد ابتدایی N برابر ۲ بوده و ویژه مقدار انرژی برحسب عدد کوانتومی n به صورت تحلیلی معین بوده و از معادله (۲) به دست می‌آید. این ارتباط خطی است. اما در حد دیگر وقتی N به بی‌نهایت میل می‌کند با مسئله ذره در جعبه مواجه هستیم. در این مورد ویژه مقدار انرژی به صورت تحلیلی به دست آمده است. رابطه ویژه مقدار انرژی با عدد کوانتومی n به شکل $E=an^2$ است. برازش انجام شده روی داده‌ها که در جدول ۳ نتایج آن آورده شده است، با توجه به معیارهای آماری صحت برازش مؤید معادله (۱۷) است.

تشکر و قدردانی

سابروتینی به نام EIGEN برای محاسبه ویژه مقادیر و ویژه توابع در برنامه تهیه شده استفاده شده است که توسط مؤسسه تحقیقاتی انیستیتوی ملی هوریا هولوبی^۱ نوشته شده است که بدین وسیله از ایشان قدردانی می‌شود.

$$\left\{ \begin{aligned} & n \left(\frac{1/77+69-1/6244}{N} - \frac{24/97344}{N^2} + \frac{218/27254}{N^3} - \frac{969/91007}{N^4} + \frac{2276/78222}{N^5} - \frac{2402/67652}{N^6} + \frac{1933/65523}{N^7} \right) \\ & + \left\{ \begin{aligned} & 0/185488 - \frac{6/15753}{N} + \frac{37/65364}{N^2} - \frac{120/58899}{N^3} + \\ & \frac{169/01487}{N^4} + \frac{111/79477}{N^5} - \frac{637/91343}{N^6} + \frac{549/69301}{N^7} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right. \quad (26)$$

۴. خلاصه و نتیجه گیری

در این مطالعه، معادله شرودینگر مربوط به پتانسیل‌های تخت به شکل معادله (۱) به صورت عددی به روش شبه طیفی بررسی شد. نتایج حاصل از این روش دقت خوب و بالای این روش را تأیید می‌کند. داده‌های محاسبه شده از روش شبه طیفی که در جدول ۲ ارائه شد با مورد خاص $N=2$ که مربوط به نوسانگر هماهنگ ساده است، تطبیق خوبی را نشان می‌دهد. از طرفی در موارد خاص نیز برخی از انرژی‌های این پتانسیل خصوصاً برای حالت پایه، در بعضی مقالات گزارش شده است. محاسبات انجام شده در این تحقیق با گزارش‌های دیگر مقایسه شده و تطبیق خوبی دارد. معادله (۱۷) که برای اولین بار ارائه می‌شود، ارتباط ویژه

۱. Horia Hulubei National Institute

مراجع

1. S H Dong, *Int. J. Theor. Phys.* **39**, 4 (2000) 1119.
2. R O Weber, *arXiv preprint arXiv 1803.02207* (2018).
3. R O Weber, *arXiv preprint arXiv 1806.01266* (2018).
4. D Kosloff and R Kosloff. *J. Comput. Phys.* **52**, 1 (1983) 35.
5. T E Simos and P S Williams, *J. Comput. Appl. Math.* **79**, 2 (1997) 189.
6. W Zhang and T E Simos, *Mediterr. J. Math.* **13**, 6 (2016) 5177.
7. J Nie and W Xian, *Nonlinear Anal. Theory, Methods Appl.* **75**, 8 (2012) 3470.
8. D T Colbert and W H Miller, *J. Chem. Phys.* **96**, 3 (1992) 1982.
9. P J Gaudreau, R M Slevinsky, H Safouhi, *Ann. Phys.* **360** (2015) 520.
10. C M Bender and T T Wu, *Phys. Rev.* **184**, 5 (1969) 1231.
11. E J Weniger, J Čížek, and F Vinette, *J. Math Phys.* **34**, 2 (1993) 571.
12. A Share and S N Behra, *Pramana J. Phys.* 14 (1980).
13. D Amin, *Phys. Rev. Lett.* **36**, 323 (1976). *phys. Today* **35** (1982) 35.
14. H R Lewis Jr and W B Riesenfeld, *J. Math Phys* **10**, 8 (1969) 1458.
15. I Gahramanov and K Tezgin, *Int. J. Modern Phys. A* **32**, 05 (2017) 1750033.
16. C M Bender and S Boettcher, *J. Phys A: Math. Gen.* **31**, 14 (1998) L273.
17. E Z Liverts, V B Mandelzweig, and F Tabakin. *J. Math. Phys.* **47**, 6 (2006) 062109.
18. H Hashimoto, *Int. J. Electron.* **46** (1979) 125, *Opt. Commu.* **32** (1980) 383.
19. P Baganu and R Budaca. *J. o Phys. G Nucl. Part. Phys.* **42**, 10 (2015) 105106.
20. C E Reid and J Mole, *Spectro* **36** (1970) 183.
21. R S Kaushal, *Ann. Phys.* **206**, 1 (1991) 90.
22. D T Colbert, G C Groenenboom, and W H Miller. *203rd American Chemical Society national meeting* (1992).
23. W Janke and H Kleinert. *Phys. Rev. Let.* **75**, 15 (1995) 2787.