

دانشگاه شهید بهشتی، دانشکده فیزیک، گروه فیزیک کاربردی

## حل عددی معادله مستقل از زمان شرودینگر با بکار گیری روش اجزاء محدود

پروژه نهایی درس فیزیک محاسباتی

محمدرضا شیرازی زاده 96416053

[mshirazizadeh@yahoo.com](mailto:mshirazizadeh@yahoo.com)

چکیده

هدف از انجام این تحقیق بکارگیری روش اجزاء محدود برای حل مسایل مکانیک کوانتومی و به صورت مشخص معادله مستقل از زمان شرودینگر است. در ابتدای کار به مروری بر مکانیک کوانتومی، معادله شرودینگر و روش های عددی بکار گرفته شده برای حل آن پرداخته می شود. سپس روش گالرکین و روش اجزاء محدود مبتنی بر آن برای حل معادلات با مشتقات جزئی معرفی می گردد. در نهایت یک المان یک بعدی برای حل مساله مقدار ویژه توسعه داده شده و به کمک آن چند مثال عددی بررسی می گردد. مثال های عددی شامل مساله ذره در چاه پتانسیل بی نهایت یک بعدی و همینطور نوسانگر هماهنگ می باشند. نتایج بدست آمده همراه با مقایسه آنها با پاسخ های تحلیلی موید دقت مناسب و رضایت بخش روش اجزاء محدود در حل معادله مستقل از زمان شرودینگر است.

واژگان کلیدی: مکانیک کوانتومی، معادله شرودینگر، روش اجزاء محدود، چاه پتانسیل

### 1. مقدمه

توسعه مکانیک کوانتومی در اوایل قرن بیستم به شناخت بسیار بهتر دنیای اتمی و زیر اتمی منجر شد. در واقع تئوری مکانیک کوانتومی در زیر ساختار بسیار بسیار بنیادین تر از تئوری های مکانیک نیوتونی و الکترومغناطیس کلاسیک بوده و تشریح بسیار دقیق تری از بسیاری از پدیده ها که هرگز در دنیای ماکروسکوپیکی دیده نمی شوند ارائه می دهد. یکی از مهمترین کاربردهای مکانیک کوانتومی در اواسط قرن بیستم توسعه و بکارگیری مواد و دستگاه های نیمه هادی مثل ترانزیستورها، دیودها، پانل های خورشیدی، لیزر و میکروپروسورها بوده است. هر چند تحقیقات حاضر در مکانیک کوانتومی و کاربردهای آن در فیزیک حالت جامد به پیشرفت های بسیار بیشتری نظیر تکنولوژی کوانتوم-دات ها و کوانتم-وایرها منجر شده است. این تکنولوژی های جدید امکان به وجود آمدن ادوات بسیار پیچیده شامل سویچ های نوری بسیار سریع و حافظه های بسیار کوچک را به وجود آورده اند.

برای آزمایش تئوری ها، کاربردها و ادوات جدید، روش ها و مدل سازی های محاسباتی جدید توسعه می یابند تا قبل از هر نوع آزمایش فیزیکی آنها را مورد مطالعه دقیق قرار داد. لذا در کنار رشد و توسعه ادوات پیشرفته تر کوانتومی، نیاز به توسعه روش ها و مدل سازی های محاسباتی با دقت و کارایی بالاتر وجود دارد. یک نکته بسیار مهم در مدل سازی ادوات کوانتومی این است که اثرات کوانتومی فقط در بخشی از آنها به صورت محلی رخ می دهد و سایر مناطق آنها را می توان به روش های کلاسیک مدل سازی کرد [1]. این موضوع از این جنبه حائز اهمیت است که مدل سازی کوانتومی همه قطعه (مثلا نیمه هادی) از لحاظ محاسباتی قابل اجرا نمی باشد. در نتیجه وجود استراتژی برای مدل سازی همزمان کوانتومی و ماکروسکوپیکی مدل از اهمیت بلایی برخوردار است.

یکی از مسایل مهم در مکانیک کوانتومی، مساله مستقل از زمان شرودینگر است که در آن سطوح مجاز انرژی و همچنین حالت های مجاز یک سیستم یا ذره شناسایی می شوند [2]. از طرفی حل دقیق این معادله برای برخی از پتانسیل ها به صورت تحلیلی در دسترس نبوده و یا بسیار دشوار به نظر می رسد. در نتیجه توسعه روش های عددی برای حل مسایل مربوط به پتانسیل های پیچیده همواره مورد توجه محققین بوده است [3]. به عنوان مثال روش تفاضلات محدود به عنوان یک روش کلاسیک در حل معادلات با مشتقات جزئی برای بررسی مساله معادله شرودینگر بکار گرفته شده است [4].

روش تفاضلات محدود با وجود سادگی و قابلیت بالا در مدل سازی مسایل با محدودیت هایی همراه است که از مهم ترین آنها می توان به اعدم توانایی این روش در مواجهه با مسایل با مرز های پیچیده اشاره کرد [5]. در نتیجه روش های کارآمد تر و کلی تری نظیر روش اجزاء محدود می توانند به عنوان جایگزین مناسب تری برای روش تفزلت محدود معرفی شوند [6].

در تحقیق پیشرو روش اجزاء محدود مبتنی بر روش گالرکین برای بررسی مساله معادله شرودینگر مستقل از زمان مورد استفاده قرار گرفته است. معادله مقدار ویژه همراه با ماتریس های المان یک بعدی استخراج و فرمول بندی شده اند. چند مساله نمونه برای صحت گذاری روش ارائه شده طراحی و پاسخ های به دست آمده با پاسخ های تحلیلی موجود مقایسه گردیده اند. نتایج حاکی از دقت مناسب روش اجزاء محدود در مدل سازی مسایل مکانیک کوانتومی است.

## 2. مروری بر مکانیک کوانتومی

به طور کلی فیزیک کوانتومی به بررسی پدیده هایی می پردازد که شامل انرژی ها و کوانتاهای ناپیوسته هستند. حرکت و رفتار پروسه های کوانتومی با بکارگیری معادله شرودینگر تشریح می شود. بکارگیری معادله شرودینگر در مطالعه پدیده های کوانتومی به عنوان مکانیک کوانتومی شناخته می شود.

## 2.1 اصول موضوعه مکانیک کوانتومی

اصل اول: وضعیت یک سیستم کوانتومی با تابع  $\psi(X, t)$  نمایش داده می شود که وابسته به مختصات فضایی- زمانی ذره است. این تابع، تابع موج یا تابع وضعیت نامیده می شود.  $\psi^*(X, t)\psi(X, t)dv$  احتمال حضور ذره در فضای در مکان  $X$  و در زمان  $t$  است. لذا خواهیم داشت:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(X, t)\psi(X, t)dv = 1 \quad (1)$$

همچنین تابع موج باید یکتا، پیوسته و متناهی باشد.

اصل دوم: برای هر مشاهده پذیر نظیر  $A$  در مکانیک کلاسیک (نظیر انرژی و یا ممنتوم) یک عملگر خطی هرمیتی نظیر  $\hat{A}$  در مکانیک کوانتومی تعریف می شود.

اصل سوم: در هر اندازه گیری از مشاهده پذیر  $A$  متناظر با عملگر  $\hat{A}$ ، تنها مقادیر قابل مشاهده، مقادیر ویژه آن عملگر هستند که در معادله زیر صدق می کنند.

$$\hat{A}\psi_a = a \cdot \psi_a \quad (2)$$

در جایی که  $\psi_a$  تابع ویژه متناظر با مقدار ویژه  $a$  از عملگر  $\hat{A}$  است.

این اصل در واقع نقطه مرکزی مکانیک کوانتومی و به این مفهوم است که مقادیر متغیرهای دینامیکی می توانند کوانتیزه شوند. همچنین سیستم می تواند در حالتی متشکل از ترکیب خطی همه توابع ویژه  $\hat{A}$  باشد.

$$\psi = \sum_i^n c_i \cdot \psi_i \quad (3)$$

در این حالت فقط می دانیم که اندازه گیری  $A$  می تواند به یکی از مقادیر  $a_i$  با احتمال  $|c_i|^2$  منجر شود.

اصل چهارم: اگر سیستم در وضعیتی با تابع موج  $\psi$  باشد، مقدار متوسط (چشمداشتی) متغیر متناظر با عملگر  $\hat{A}$  برابر است با:

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(X, t) \cdot \hat{A} \cdot \psi(X, t)dv \quad (4)$$

اصل پنجم: تابع موج سیستم به صورت معادله زیر در زمان تغییر می کند.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(X, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(X, t) + V(X) \cdot \psi(X, t) \quad (5)$$

## 2.2 معادله شرودینگر

در سال 1925 اروین شرودینگر یک روش در مکانیک کوانتومی شامل معادلات دیفرانسیل را ابداع کرد [7]. این روش با روشی که پیشتر توسط هایزنبرگ به صورت معادلات ماتریسی ارائه شده بود متفاوت است. بعدها اثبات شد که تفسیر این دو روش که یکی مبتنی بر معادلات دیفرانسیل و دیگری مبتنی بر فرم ماتریسی است کاملا از لحاظ ریاضی یکسان است [8].

### 2.2.1 معادله مستقل از زمان شرودینگر

یکی از اساسی ترین مفاهیم فیزیک کوانتومی دوگانی ذره-موج است. این موضوع به معنی این است که موج می تواند رفتار ذره ای و ذره می تواند رفتار موجی از خود نشان دهد. به عنوان مثال انیشتین نشان داد که فتون که به عنوان یک بسته موج شناخته می شود، دقیقا مشابه با یک ذره که با انرژی معادل حرکت می کند، دارای ممنتوم است. رفتار دینامیکی این ذره-موج ها می تواند به کمک مکانیک موجی در حالت های غیر نسبیتی بیان شود.

معادله حرکت وابسته به زمان یک ذره تنها به صورت معادله (5) بیان می شود که به معادله شرودینگر معروف است. همانطور که گفته شد این معادله یکی از اصول موضوعه مکانیک کوانتومی است و آن را نمی توان مستقلا استخراج کرد. اما معادله دیگری که به معادله مستقل از زمان شرودینگر معروف است، به صورت تحلیلی قابل استنتاج است. در اینجا می خواهیم نحوه به دست آوردن معادله مستقل از زمان شرودینگر را تشریح کنیم.

معادله کلاسیک موج یک بعدی را در نظر بگیرید:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} ; u = u(x, t) \quad (6)$$

با جدا سازی متغیرها خواهیم داشت:

$$u(x, t) = \psi(x) \cdot f(t) \quad (7)$$

با قرار دادن در معادله دیفرانسیل

$$f(t) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{1}{v^2} \psi(x) \frac{d^2}{dt^2} f(t) \quad (8)$$

سپس با استفاده از حل استاندارد معادله موج  $f(t) = e^{i\omega t}$  خواهیم داشت:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -\frac{\omega^2}{v^2} \psi(x) \quad (9)$$

معادله فوق یک معادله دیفرانسیل معمولی است که توضیح دهنده شدت موج بر حسب مکان است که می تواند در معادله شرودینگر قرار گیرد.

با توجه به اینکه انرژی ذره مشتمل بر انرژی جنبشی و پتانسیل آن است می توان نوشت:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (10)$$

از طرفی داریم  $h = P\lambda$  ;  $v = \bar{v}\lambda$  ;  $\omega = 2\pi\nu$  ; لذا:

$$\frac{\omega^2}{v^2} = \frac{4\pi\bar{v}^2}{v^2} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \quad (11)$$

زمانی که این معادله با معادله (9) ترکیب شود خواهیم داشت:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2m}{\hbar} (E - V(x)) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad (12)$$

که بیانگر معادله مستقل از زمان شرودینگر است. این معادله ذره برای حرکت یک بعدی می تواند برای حرکت سه بعدی ذره به شکل زیر تعمیم پیدا کند.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(X) + V(X) \cdot \psi(X) = E \cdot \psi(X) \quad ; X = [x, y, z]^T \quad (13)$$

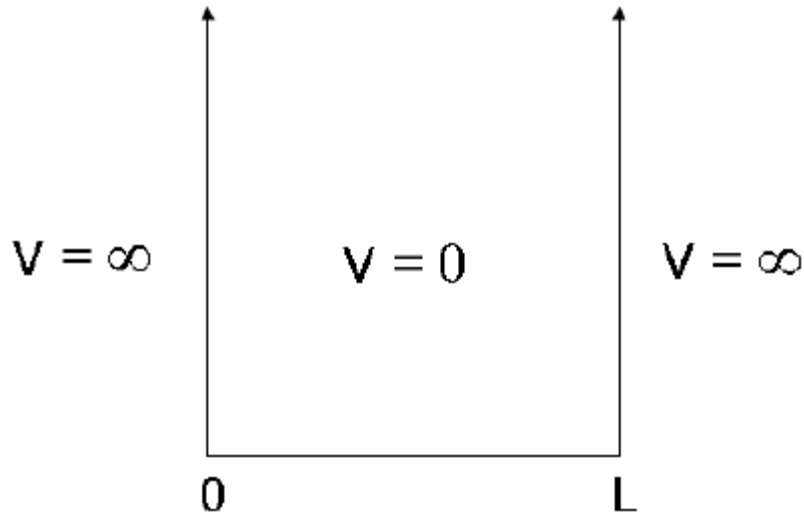
حل این معادله بیانگر تابع موج ذره با جرم  $m$  در پتانسیل  $V(X)$  است.

## 2.3 حل تحلیلی

### 2.3.1 ذره در جعبه

به عنوان یک مثال ذره ای را در نظر بگیرید که در یک جهت مجاز است بین  $0 < x < L$  حرکت کند. پتانسیل در این فاصله صفر و در خارج از آن بینهایت است (شکل 1). از آنجا که تابع موج نباید نامتناهی باشد لذا در جاهایی که پتانسیل بینهایت است حتما باید مقدار آن صفر باشد. در نتیجه شرایط مرزی مساله به صورت زیر بیان می شوند.

$$\psi(0) = 0 \text{ and } \psi(L) = 0$$



شکل 1. چاه پتانسیل بی نهایت

لذا  $\psi(x)$  فقط در بازه  $0 < x < L$  غیر صفر است.

معادله شرودینگر برای این مثال ساده به صورت زیر بیان می شود.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad 0 < x < L \quad (14)$$

با حل این معادله و نرمالیزه کردن پاسخ خواهیم داشت:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (15)$$

و در مقادیر ویژه متناظر:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2L^2 m}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (16)$$

### 2.3.2 نوسانگر هماهنگ

حالا یک ذره متصل به یک فنر کلاسیک با پتانسیل زیر را در نظر بگیرید.

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 \quad (17)$$

معادله شرودینگر مستقل از زمان با در نظرگیری این پتانسیل به صورت زیر نوشته می شود.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2}Kx^2 = E \cdot \psi(x) \quad 0 < x < L \quad (18)$$

حل کلی این معادله بعد از نرمالیزه شدن به صورت زیر خواهد بود.

$$\psi_n(x) = \frac{\alpha^{\frac{1}{4}}}{\pi} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (19)$$

در جایی که مقدار ویژه های انرژی عبارتند از:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (20)$$

در معادلات بالا  $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$  و  $y = \sqrt{\alpha} x$  بوده و  $H_n(y)$  چند جمله ای های هرمیتی هستند که در شکل 2 آمده اند.

$n$	$H_n(y)$	$E_n$
0	1	$\frac{1}{2} \hbar\omega$
1	$2y$	$\frac{3}{2} \hbar\omega$
2	$4y^2 - 2$	$\frac{5}{2} \hbar\omega$
3	$8y^3 - 12y$	$\frac{7}{2} \hbar\omega$
4	$16y^4 - 48y^2 + 12$	$\frac{9}{2} \hbar\omega$
5	$32y^5 - 160y^3 + 120y$	$\frac{11}{2} \hbar\omega$

شکل 2. توابع هرمیتی و انرژی های متناظر

#### 4. اصول روش اجزاء محدود

زمانی که پتانسیل  $V(x)$  یک تابع پیچیده باشد یا بخواهیم مدل های پیچیده تر شامل چندین ذره را بررسی کنیم، روش های تحلیلی برای حل معادله شرودینگر قابل اجرا نیستند. لذا نیاز به روش عددی برای حل آنها وجود دارد. یکی از متداول ترین روش های عددی بکار گرفته شده برای حل معادله شرودینگر تفاضلات محدود است [4]. هرچند این روش به شکل ساده ای می تواند معادلات پیچیده را گسسته سازی و حل کند، نقطه ضعف آن در برخورد با هندسه ها و شرایط مرزی پیچیده است. روش قابل اطمینان تر و کلی تر عددی که قادر به حل معادلات پیچیده در هر نوع هندسه ایست، روش اجزاء محدود نامیده می شود. علاوه بر این می توان گفت که روش تفاضلات محدود در واقع نوع خاصی از روش اجزاء محدود است. در واقع اگر توابع شکل به کار گرفته شده در اجزاء محدود از نوع تابع دلتای دیراک انتخاب شده و مش بندی به صورت کاملاً یکدست انجام شود، خواهید دید که معادلات اجزاء محدود به معادلات تفاضلات محدود کاهیده خواهند شد. در این بخش قصد داریم ضمن بیان اصول اولیه روش اجزاء محدود، این روش را برای حل معادله مستقل از زمان شرودینگر بکار ببریم.

##### 4.1 روش گالرکین برای حل معادلات دیفرانسیل

یکی از مهمترین شاخه های روش اجزاء محدود، روش اجزاء محدود مبتنی بر روش گالرکین است. لذا پیش از مرور اصول اولیه روش اجزاء محدود، به بررسی این روش پرداخته می شود. روش گالرکین یک روش تحلیلی اما تقریبی برای حل معادلات دیفرانسیل است. برای توضیح این روش از یک مثال استفاده می کنیم.

فرض کنید که می خواهیم یک معادله دیفرانسیل با شرایط مرزی به شکل زیر را حل کنیم.

$$\begin{cases} \frac{d^2 y}{dx^2} + Q y(x) = 0 \\ y(a) = \alpha \quad a < x < b \\ y(b) = \beta \end{cases} \quad (21)$$

در صورتی که حل تحلیلی این معادله امکان پذیر نباشد، حداقل می توانیم یک تابع دلخواه  $\hat{y}(x)$  برای پاسخ آن حدس بزنیم. تابع حدس به صورت چند جمله ای  $y(x) = \sum_i^N a_i w_i(x)$  با ضرایب نامعین  $a_i$  نوشته می شود. یقیناً این تابع حدس بر پاسخ واقعی مساله منطبق نیست اما حداقل شرایط مرزی مساله را باید ارضا کند. در نتیجه اگر تابع حدس را در معادله دیفرانسیل قرار دهیم دیگر پاسخ سمت راست صفر نخواهد بود. نام این انحراف از صفر را تابع خطا یا  $R(x) = \frac{d^2 \hat{y}}{dx^2} + Q \hat{y}(x)$  می گذاریم. حال اگر بتوان  $R(x)$  را به نحوی به حداقل رساند، می توان گفت که  $\hat{y}(x)$  تقریب مناسبی از  $y(x)$  است. در روش گالرکین شرط حداقل شدن خطا به صورت معادله زیر بیان می شود.



$$\int_a^b R(x)w_i(x)dx = 0 \quad i = 1..N \quad (22)$$

با حل این دستگاه معادله جبری می توان  $N$  مجهول  $a_i$  را محاسبه کرد و  $\hat{y}(x)$  را به عنوان پاسخ تقریبی مساله به دست آورد. به عنوان مثال معادله دیفرانسیل زیر را در نظر بگیرید.

$$\begin{cases} \frac{d^2y}{dx^2} - x = 0 \\ y(0) = 0 \quad 0 < x < 1 \\ y(1) = 0 \end{cases}$$

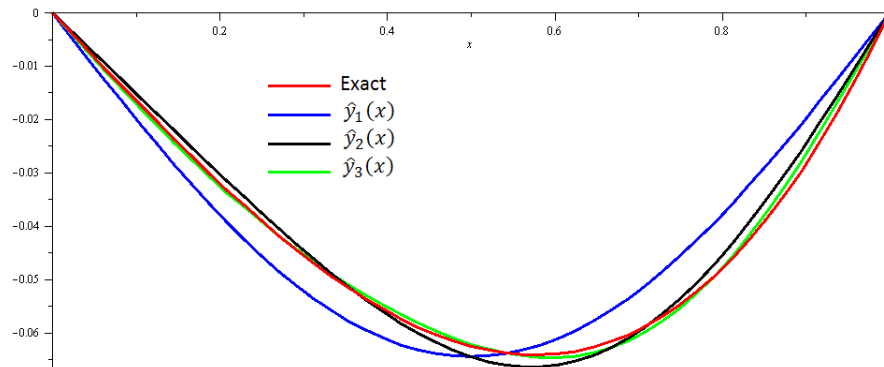
پاسخ تحلیلی آن به صورت زیر بیان می شود.

$$y(x) = \frac{x^3}{6} - \frac{x}{6}$$

حال می خواهیم این معادله را به روش گالرکین حل کنیم. تابع حدس را یکبار با یک جمله، بار دیگر با دو و در نهایت با سه جمله به شکل زیر تشکیل می دهیم.

$$\begin{cases} \hat{y}_1(x) = a_1 \sin(\pi x) \\ \hat{y}_2(x) = a_1 \sin(\pi x) + a_2 \sin(2\pi x) \\ \hat{y}_3(x) = a_1 \sin(\pi x) + a_2 \sin(2\pi x) + a_3 \sin(3\pi x) \end{cases}$$

دقت کنید که در هر سه حالت، شرایط مرزی مساله ارضا می شود. با قرار دادن توابع حدس بالا در رابطه (22) و محاسبه ضرایب مجهول، پاسخ تقریبی مساله به دست می آید. همانطور که در شکل 3 پیداست، با افزایش تعداد جملات تابع حدس، پاسخ به دست آمده به پاسخ تحلیلی نزدیک تر می شود.



شکل 3. پاسخ تحلیلی و تقریبی معادله دیفرانسیل با سه تابع حدس مختلف

## 4.2 اصول روش اجزاء محدود مبتنی بر روش گالرکین

گفته شد که اگر یک معادله دیفرانسیل پیچیده در یک هندسه پیچیده مورد نظر باشد روش های تحلیلی معمولاً قادر به حل آن نیستند. در روش اجزاء محدود این اصل مورد پذیرش قرار گرفته است که اگر یک معادله در یک دامنه مفروض حاکم باشد، در هر یک از اجزاء آن دامنه هم صادق است. لذا می توان یک دامنه پیچیده را به اجزاء کوچک و ساده ای تقسیم بندی و معادله حاکم را در هر یک از آنها به طور جداگانه حل کرد و سپس پاسخ کل مساله را به دست آورد. در شکل 4 گسسته سازی فضایی یک، دو و سه بعدی نمایش داده شده است.

به هر یک از اجزاء تشکیل دهنده دامنه اصطلاحاً المان گفته می شود. المانها به کمک نقاط کلیدی که تشکیل دهنده مرز آنها هستند، به همدیگر متصل می شوند تا یکپارچگی دامنه حفظ شود. به این نقاط کلیدی اصطلاحاً گره گفته می شود. حال فرض کنید می خواهیم یک معادله دیفرانسیل دلخواه به شکل زیر را در یک دامنه دلخواه حل کنیم.

$$f\left(\phi(X), \frac{\partial \phi}{\partial X}, \frac{\partial^2 \phi}{\partial X^2}, X\right) = 0 \quad ; X = [x, y, z]^T \quad (23)$$

گفته شد که معادله بجای کل دامنه در یک المان دلخواه از آن دامنه بررسی می شود. تابع حدس  $\phi(X)$  که می تواند در این معادله صدق کند به صورت ترکیبی  $\phi(X) = \sum_i^N S_i(x) \phi_i$  از مقادیر گره ای  $\phi_i$  در المان مورد نظر نوشته می شود.

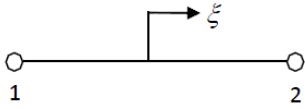
که در رابطه فوق  $\phi_i$  مقدار تابع در گره  $i$  ام و  $S$  تابع وزنی است که در اجزاء محدود تابع شکل خوانده می شود. هر المان استاندارد در اجزاء محدود توابع شکل مخصوص به خود را دارد که محاسبه آنها ساده بوده و جزئیات روش محاسبه آنها در کتاب های اجزاء محدود موجود است [6]. در شکل 4 توابع شکل چند نوع المان استاندارد آورده شده است. دقت کنید که هر چه قدر تعداد گره های یک المان بیشتر باشد درجه توابع شکل آن بالاتر رفته و لذا تابع حدس با درجه بالاتری می توان برای پاسخ مساله اختیار کرد.

حال می توان تابع حدس را در معادله گالرکین قرار داد.

$$\int f\left(\sum_i^N S_i(X) \phi_i, \frac{\partial}{\partial X} \sum_i^N S_i(X) \phi_i, \frac{\partial^2}{\partial X^2} \sum_i^N S_i(X) \phi_i, X\right) \cdot S_i(X) dX = 0 \quad (24)$$

با حال دستگاه معادله بالا کلیه مجهولات که همان مقادیر عددی تابع در گره های المان  $\phi_i$ ، هستند بدست می آید.

### 1D Linear Element

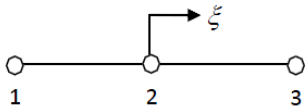


general form  $S = A + B\xi$

$$S_1 = \frac{(\xi - \xi_2)}{(\xi_1 - \xi_2)} = \frac{1}{2}(1 - \xi)$$

$$S_2 = \frac{(\xi - \xi_1)}{(\xi_2 - \xi_1)} = \frac{1}{2}(\xi + 1)$$

### 1D Quadratic Element



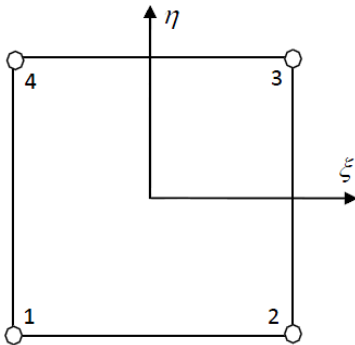
general form  $S = A + B\xi + C\xi^2$

$$S_1 = \frac{(\xi - \xi_2)(\xi - \xi_3)}{(\xi_1 - \xi_2)(\xi_1 - \xi_3)} = \frac{1}{2}\xi(\xi - 1)$$

$$S_2 = \frac{(\xi - \xi_1)(\xi - \xi_3)}{(\xi_2 - \xi_1)(\xi_2 - \xi_3)} = -(\xi + 1)(\xi - 1)$$

$$S_3 = \frac{(\xi - \xi_1)(\xi - \xi_2)}{(\xi_3 - \xi_1)(\xi_3 - \xi_2)} = \frac{1}{2}\xi(\xi + 1)$$

### 4-node Linear Quadrilateral Element



general form  $S = A + B\xi + C\eta + D\xi\eta$

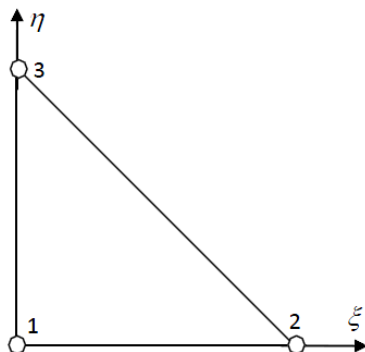
$$S_1 = \frac{(\xi - 1)(\eta - 1)}{(\xi_1 - 1)(\eta_1 - 1)} = \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta)$$

$$S_2 = \frac{(\xi - (-1))(\eta - 1)}{(\xi_2 - (-1))(\eta_2 - 1)} = \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta)$$

$$S_3 = \frac{(\xi - (-1))(\eta - (-1))}{(\xi_3 - (-1))(\eta_3 - (-1))} = \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta)$$

$$S_4 = \frac{(\xi - 1)(\eta - (-1))}{(\xi_4 - 1)(\eta_4 - (-1))} = \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta)$$

### 3-node Linear Triangular Element



general form  $S = A + B\xi + C\eta$

$$S_1 = 1 - \xi - \eta$$

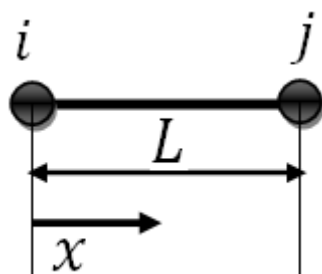
$$S_2 = \xi$$

$$S_3 = \eta$$

شکل 4. برخی المان های استاندارد یک و دو بعدی و توابع شکل آنها

## 5. فرمول بندی یک المان خاص برای حل معادله مستقل از زمان شرودینگر

گفته شد که معادله مستقل از زمان شرودینگر از رابطه (13) تبعیت می کند. فرض کنید می خواهیم این معادله را در فضای 1 بعدی با یک پتانسیل مشخص، به روش اجزاء محدود گالرکین حل کنیم. برای اینکار احتیاج به یک المان خطی یک بعدی با دو گره به صورت شکل 5 داریم.



شکل 5. المان خطی دو گره ای

توابع شکل این المان در دستگاه مختصات انتخاب شده در معادله (25) نمایش داده شده است.

$$\begin{cases} S_i(x) = \frac{x_j - x}{L} \\ S_j(x) = \frac{x}{L} \end{cases} \quad (25)$$

تابع حدس به صورت ترکیبی خطی از مقادیر تابع در گره ها به شکل زیر نوشته می شوند.

$$\psi(x) = [S_i(x) \quad S_j(x)] \begin{Bmatrix} \psi_i \\ \psi_j \end{Bmatrix} \quad (26)$$

حال با اعمال شرط گالرکین خواهیم داشت:

$$\int_0^L S_k(x) \cdot (E\psi(x) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - V(x)\psi(x)) dx, \quad k = i, j \quad (27)$$

پس از جایگذاری توابع شکل و تابع حدس از معادلات (25) و (26) در (27) و انتگرال گیری در دامنه المان و مرتب سازی به صورت ماتریسی، رابطه مقدار ویژه زیر بدست می آید. با حل این رابطه مقادیر ویژه برای انرژی ها مجاز سیستم و همبندطور بردارهای ویژه معرف دامنه احتمال حضور ذره تعیین می شوند.

$$\left( \frac{\hbar^2}{2mL} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \int_0^L S_i^2 V(x) dx & \int_0^L S_i S_j V(x) dx \\ \int_0^L S_i S_j V(x) dx & \int_0^L S_j^2 V(x) dx \end{bmatrix} - \frac{EL}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \right) \begin{Bmatrix} \psi_i \\ \psi_i \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (28)$$

در اینجا لازم است که به این نکته اشاره شود که معادله (28) برای یک تک المان است. برای حل مساله در کل دامنه ابتدا باید معادله (28) برای تک تک المان هایی که دامنه توسط آنها تقسیم بندی شده، نوشته شود و پس از اسمبل کردن همه معادلات نوشته شده به یک معادله کلی برای کل دامنه رسید و سپس این معادله کلی را حل کرد. نحوه اسمبل کردن معادلات ماتریسی را می توان در کتاب های اجزاء محدود مثل مرجع [6] یافت.

## 6. مثال های عددی و تجزیه و تحلیل نتایج

در این قسمت برای اثبات کارایی و دقت مناسب روش اجزاء محدود در حل معادله مستقل از زمان شرودینگر دو مثال عددی بررسی شده و نتایج همراه با مقایسه آنها با پاسخ های تحلیلی ارائه گردیده است.

### 6.1 مثال اول: ذره در چاه بی نهایت

به عنوان مثال اول، مثال کلاسیک ذره در جعبه در نظر گرفته شده است. چاه پتانسیل یک بعدی به طول یک متر به زبان ریاضی به شکل زیر تعریف می شود.

$$\begin{cases} 0 & 0 < x < 1 \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases}$$

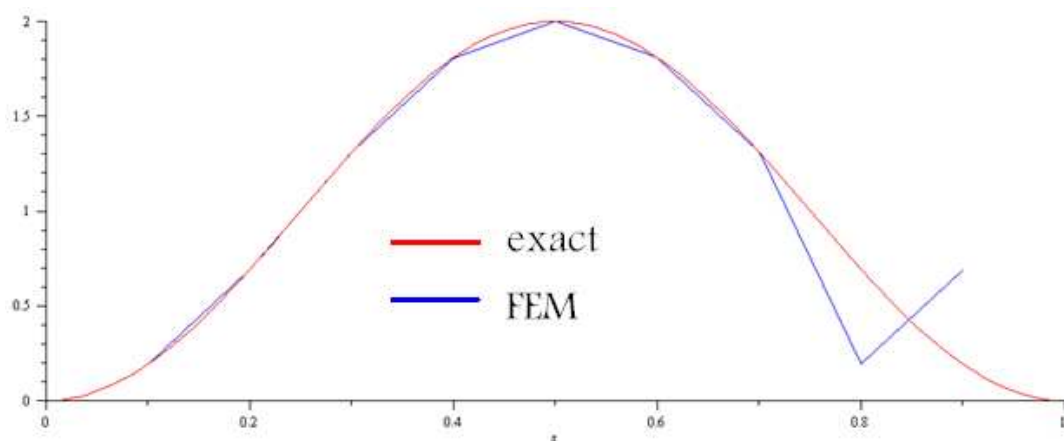
از آنجا که تابع موج باید یک تابع متناهی باشد، شرایط مرزی به صورت زیر تعریف می گردد.

$$\psi(0) = 0, \psi(1) = 1$$

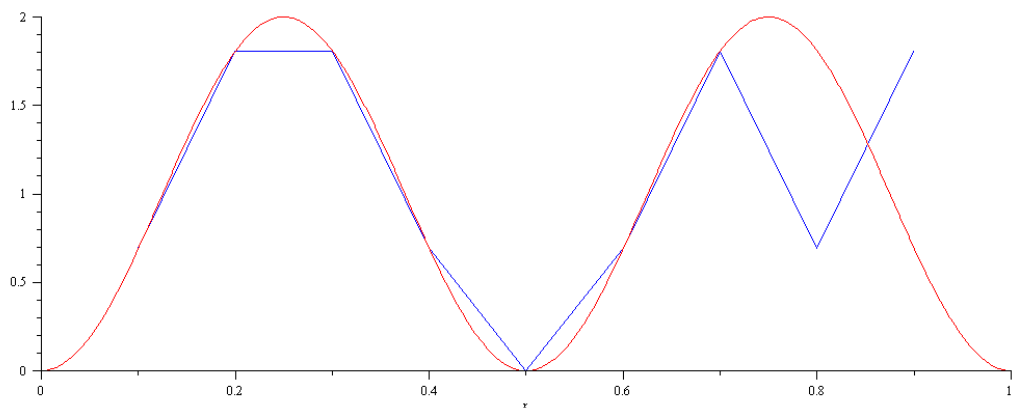
هدف بررسی حرکت ذره به جرم 1 گرم در این پتانسیل است. طول 1 متری جعبه مورد نظر یک بار با 10 یکبار با 100 و بار دیگر با 200 المان خطی 2 گره ای با طول مساوی تقسیم بندی شده است. نتایج حاصل برای 5 انرژی مجاز اول سیستم همراه با مقایسه با نتایج تحلیلی حاصل از رابطه (16) در جدول 1 آمده است. همانطور که ملاحظه می شود با افزایش تعداد المانها و ریزتر کردن تقسیم بندی دامنه، نتایج عددی به سمت نتیجه تحلیلی همگرا می شوند. شکل های 6 تا 20 تابع احتمال حضور ذره در مکان را برای حالت های مختلف بیان می کنند. از شکل ها مشخص است که هرچه تقسیم بندی ها ریزتر باشند تابع احتمال یافت شده توسط روش اجزاء محدود تطابق مناسب تری با تابع احتمال تحلیلی دارد.

Element Numbers	$E_1$		$E_2$		$E_3$		$E_4$		$E_5$	
	FEM	Eq.16	FEM	Eq.16	FEM	Eq.16	FEM	Eq.16	FEM	Eq.16
10	$5.531 \times 10^{-65}$		$2.271 \times 10^{-64}$		$3.319 \times 10^{-64}$		$9.991 \times 10^{-64}$		$1.675 \times 10^{-63}$	
100	$5.5493 \times 10^{-65}$	$5.5492 \times 10^{-65}$	$2.199 \times 10^{-64}$	$2.197 \times 10^{-64}$	$4.964 \times 10^{-64}$	$4.944 \times 10^{-64}$	$8.799 \times 10^{-64}$	$8.788 \times 10^{-64}$	$1.375 \times 10^{-63}$	$1.373 \times 10^{-63}$
200	$5.5492 \times 10^{-65}$		$2.197 \times 10^{-64}$		$4.944 \times 10^{-64}$		$8.790 \times 10^{-64}$		$1.374 \times 10^{-63}$	

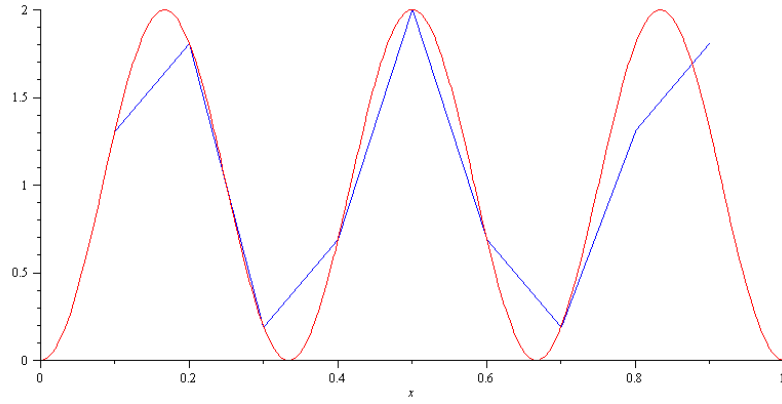
جدول 1 نتایج حاصل برای انرژی های مجاز ذره در جعبه از دو روش اجزا محدود و تحلیلی



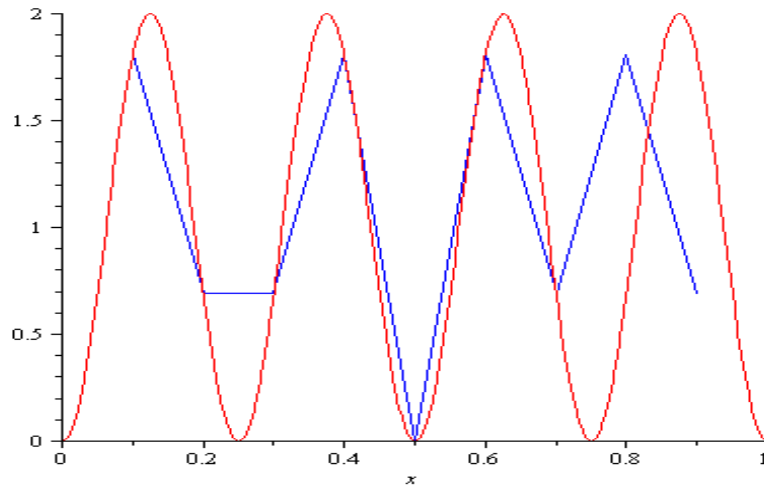
شکل 6. تابع احتمال حضور ذره بر حسب مکان در مود اول محاسبه شده با 10 المان



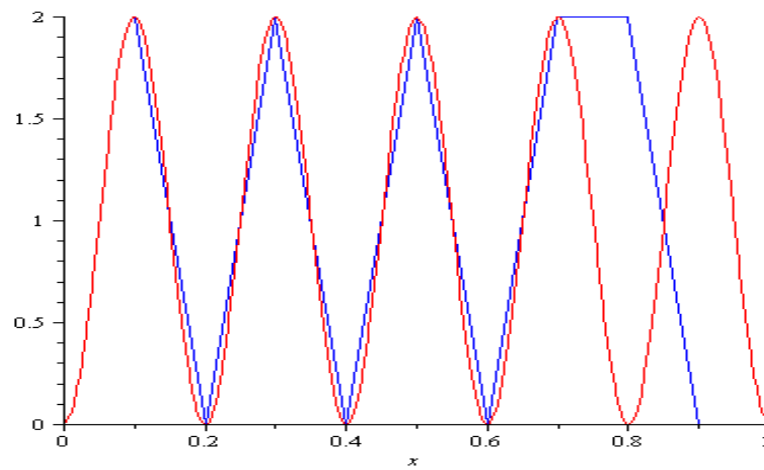
شکل 7. تابع احتمال حضور ذره بر حسب مکان در مود دوم محاسبه شده با 10 المان



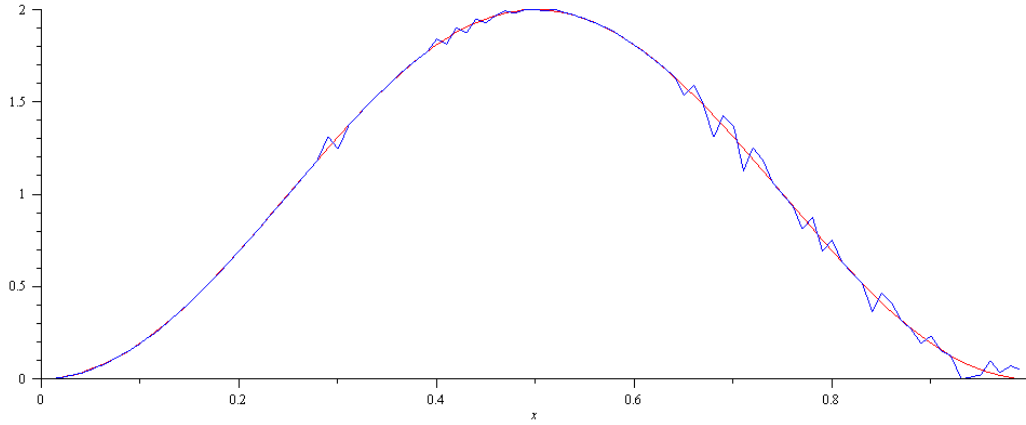
شکل 8. تابع احتمال حضور ذره بر حسب مکان در مود سوم محاسبه شده با 10 المان



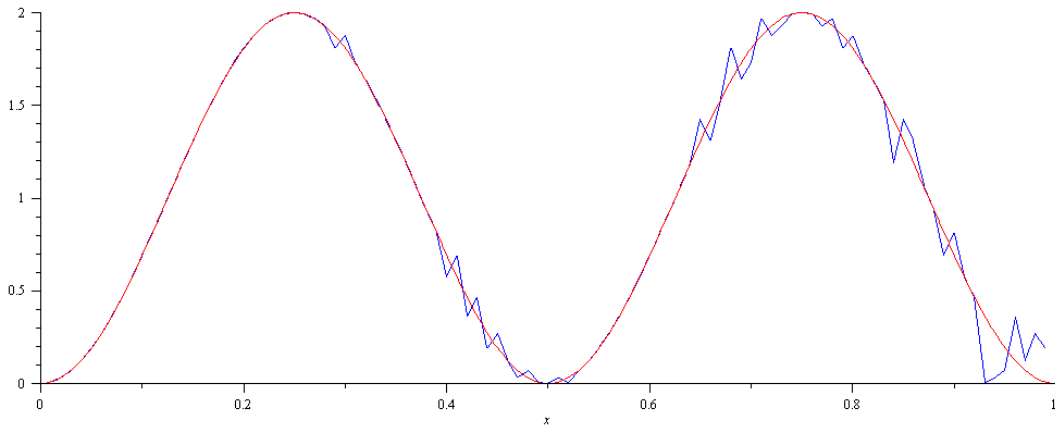
شکل 9. تابع احتمال حضور ذره بر حسب مکان در مود چهارم محاسبه شده با 10 المان



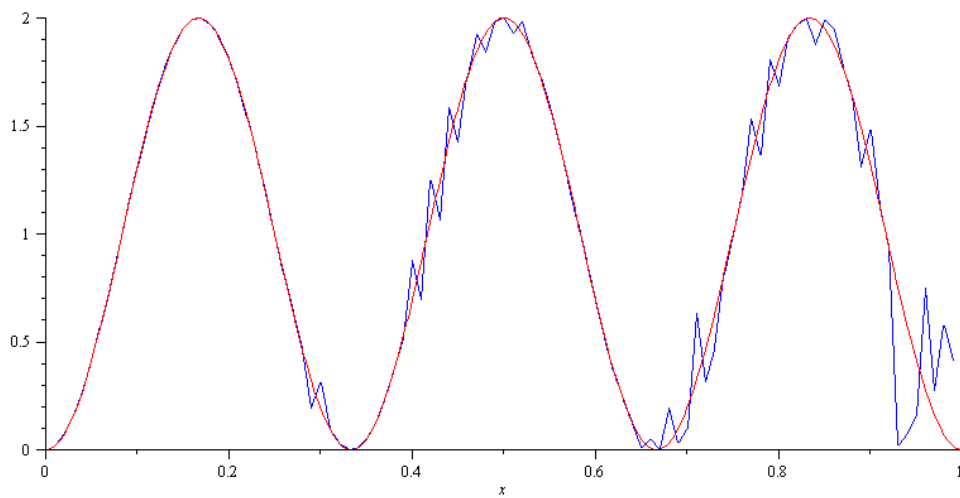
شکل 10. تابع احتمال حضور ذره بر حسب مکان در مود پنجم محاسبه شده با 10 المان



شکل 11. تابع احتمال حضور ذره بر حسب مکان در مود اول محاسبه شده با 100 المان

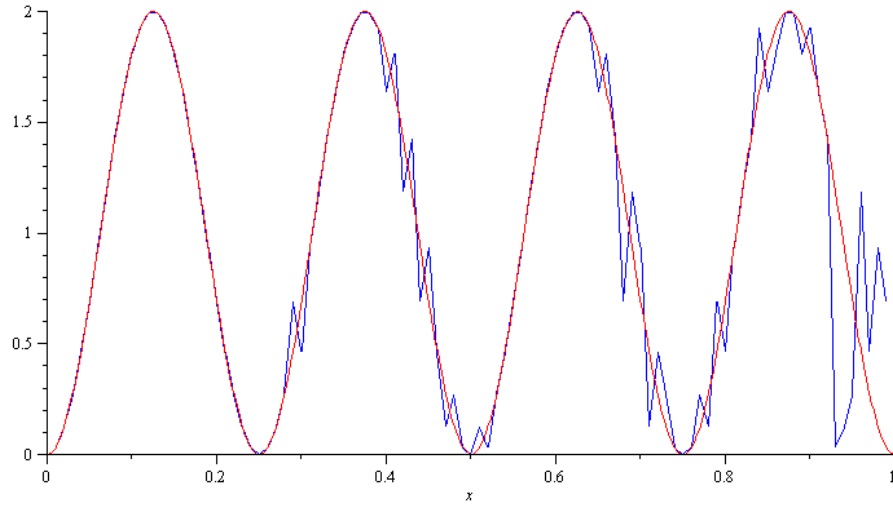


شکل 12. تابع احتمال حضور ذره بر حسب مکان در مود دوم محاسبه شده با 100 المان

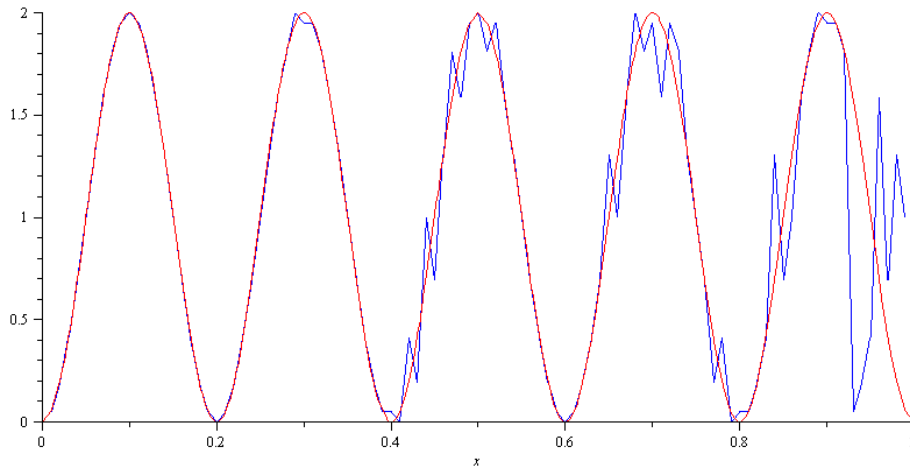


شکل 13. تابع احتمال حضور ذره بر حسب مکان در مود سوم محاسبه شده با 100 المان

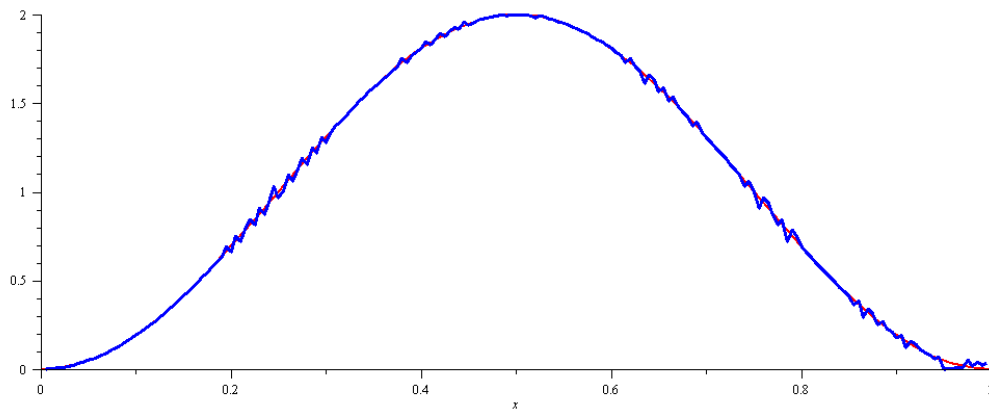




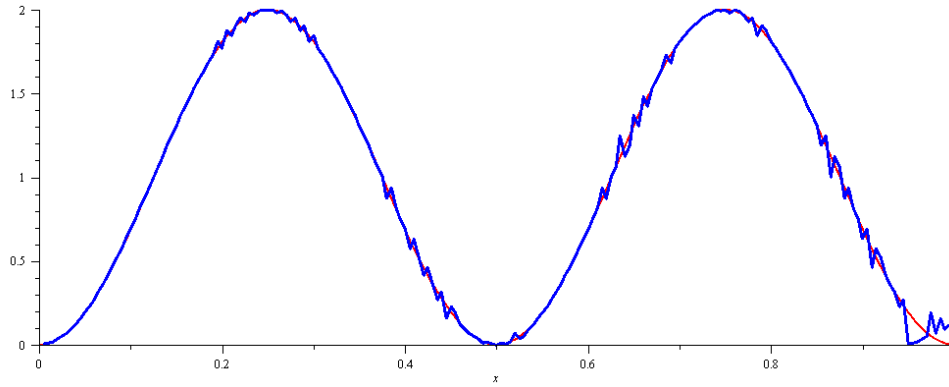
شکل 14. تابع احتمال حضور ذره بر حسب مکان در مود چهارم محاسبه شده با 100 المان



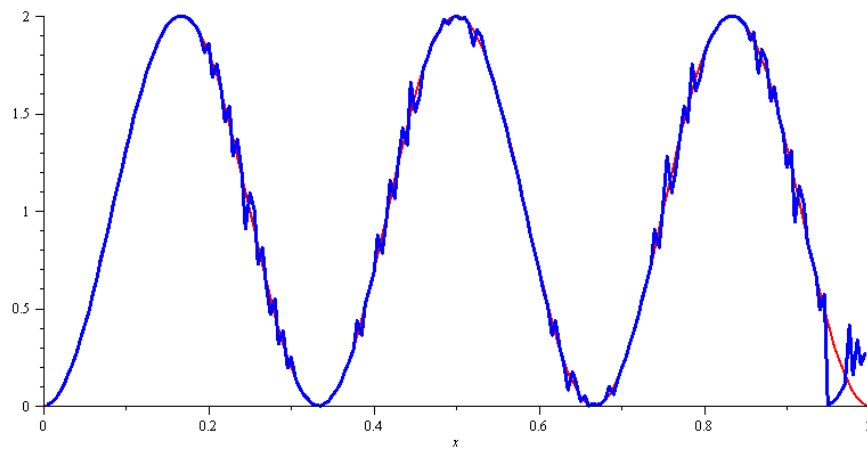
شکل 15. تابع احتمال حضور ذره بر حسب مکان در مود پنجم محاسبه شده با 100 المان



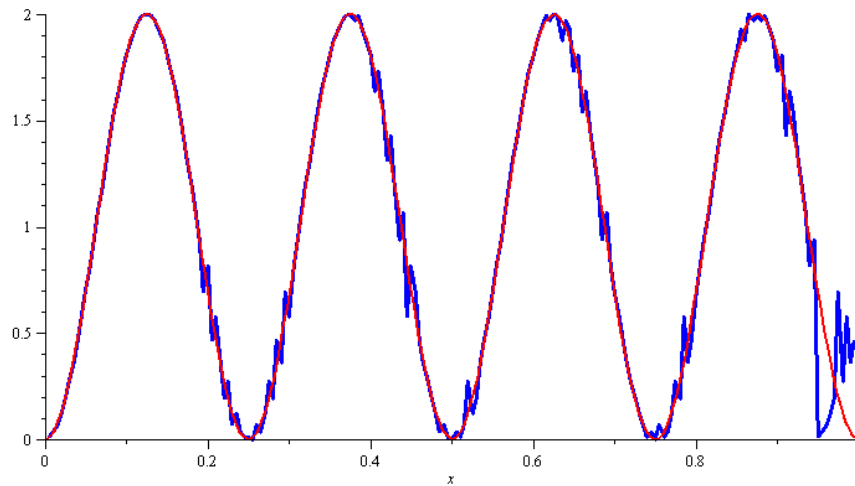
شکل 16. تابع احتمال حضور ذره بر حسب مکان در مود اول محاسبه شده با 200 المان



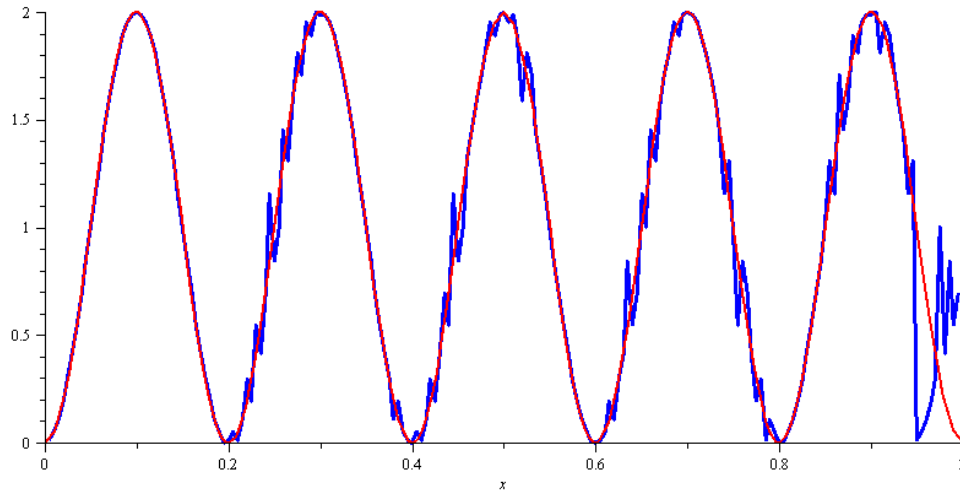
شکل 17. تابع احتمال حضور ذره بر حسب مکان در مود دوم محاسبه شده با 200 المان



شکل 18. تابع احتمال حضور ذره بر حسب مکان در مود سوم محاسبه شده با 200 المان



شکل 19. تابع احتمال حضور ذره بر حسب مکان در مود چهارم محاسبه شده با 200 المان



شکل 20. تابع احتمال حضور ذره بر حسب مکان در مود پنجم محاسبه شده با 200 المان

## 6.2 مثال دوم: نوسانگر هماهنگ

در این مثال به بررسی نوسانات کوانتومی یک الکترون محصور شده در یک پتانسیل  $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$  پرداخته می شود. مقادیر عددی پارامترهای این مساله عبارتند از:

$$m_e = 9.109 \times 10^{-31} \text{kg}$$

$$k = 10^{-39}$$

با توجه به پتانسیل انتخاب شده، این مساله در واقع یک نوسانگر هماهنگ با فرکانس طبیعی  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$  است.

انرژی های مجاز این سیستم به صورت تحلیلی از معادله (20) بدست می آید. در اینجا قصد داریم تا مساله را به روش اجزاء محدود حل و نتایج را با حل تحلیلی مقایسه کنیم. تفاوت عمده این مثال با مثال قبلی در این است که نمی توان مرز مشخصی برای چاه پتانسیل در نظر گرفت. چرا که شکل تابع پتانسیل سهمی است که هرچه از مرکز دورتر شویم مقدار آن بیشتر می شود. در عمل تابع احتمال حضور ذره در فاصله ای از مرکز به صفر میل می کند که این فاصله از پیش برای ما مشخص نیست. لذا اعمال شرایط مرزی در این مساله به راحتی انجام پذیر نیست. در نتیجه مساله را باید با در نظرگیری طول های متفاوت برای چاه پتانسیل حل کرد و با مقایسه نتایج به پاسخ منطقی دست یافت. در نتیجه مدل سازی چاه و شرایط مرزی آن به صورت پارامتری و به شکل زیر انجام می گردد.

$$-L < x < x$$

$$V(x) = \frac{1}{2} kx$$

$$\psi(-L) = 0$$

$$\psi(L) = 0$$

برای اینکه مقدار مناسب  $L$  را پیدا کنیم مساله را در چهار حالت مختلف حل می کنیم.

$$L = 1m ; L = 2m ; L = 3m ; L = 4m$$

در هر بار طول دامنه به کمک 200 المان تقسیم بندی می شود. نتایج حاصله همراه با مقایسه آنها با نتایج تحلیلی در جدول 2 آمده است. همانطور که پیداست با افزایش طول بازه مورد بررسی پسرخ های اجزاء محدود به پاسخ تحلیلی همگرا می شوند.

$L$	$E_1$		$E_2$		$E_3$		$E_4$		$E_5$	
	FEM	Eq.20	FEM	Eq.20	FEM	Eq.20	FEM	Eq.20	FEM	Eq.20
1	$1.514 \times 10^{-39}$	$1.747 \times 10^{-39}$	$6.044 \times 10^{-39}$	$5.243 \times 10^{-39}$	$1.358 \times 10^{-38}$	$8.738 \times 10^{-39}$	$2.414 \times 10^{-37}$	$1.223 \times 10^{-38}$	$3.772 \times 10^{-37}$	$1.573 \times 10^{-38}$
4	$1.825 \times 10^{-39}$		$5.853 \times 10^{-39}$		$1.097 \times 10^{-38}$		$1.768 \times 10^{-38}$		$2.620 \times 10^{-38}$	
10	$1.748 \times 10^{-39}$		$5.245 \times 10^{-39}$		$8.745 \times 10^{-39}$		$1.225 \times 10^{-38}$		$1.575 \times 10^{-38}$	
20	$1.748 \times 10^{-39}$		$5.244 \times 10^{-39}$		$8.742 \times 10^{-39}$		$1.224 \times 10^{-38}$		$1.574 \times 10^{-38}$	

جدول 2 نتایج حاصل برای انرژی های مجاز نواسنگر هماهنگ از دو روش اجزا محدود و تحلیلی

مراجع

[1] WIAS, Quantum Mechanical and Macroscopic Models for Optoelectronic

Devices, <http://www.wias-berlin.de/project-areas/micro-el/fzt/FZT86-D4.html>

[2] A. S. Sehra, Finite Element Analysis of the Schrodinger Equation, MS Thesis, SCHOOL OF ENGINEERING, UNIVERSITY OF WALES SWANSEA, 2007

- [3] N. Watanabe and M. Tsukada, Finite element approach for simulating quantum electron dynamics in a magnetic field, Jour. Phys Soc. Jap. 69 No.9 2962 (2000).
- [4] R. Chen, Z. Xu and L. Sun, Finite-Difference Scheme to Solve Schrodinger Equations, Phys. Rev. E 47, 3799-3802 (1993).
- [5] C. F. Gerald and P. O. Wheatley, Applied Numerical Analysis, Pearson Addison Wesley (2003).
- [6] O. C. Zienkiewicz and Y. K. Cheung, The Finite Element Method in Engineering Science, McGraw-Hill London (1967).
- [7] J.J Sakurai, J. Napolitano, Modern Quantum Mechanics. Second Edition.
- [8] Wikipedia, Finite Element Method.