

(دریافت مقاله: ۱۳۸۸/۷/۲۷؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۸۹/۵/۱۷)

استفاده نمایند. این الگو کمک زیادی به ساده‌سازی حل مسئله می‌نمود. اهمیت این مدل ساده برای بررسی سیستم‌های محدود شده، بعدها در زمینه‌های مختلف علمی آشکار گشت. طی یک دهه اخیر سیستم‌های کوانتومی محدود شده به طور چشمگیری مورد توجه واقع شده‌اند. در این زمینه مواردی چون چاه‌های کوانتومی، سیم‌های کوانتومی و نقاط کوانتومی در فیزیک حالت جامد به خوبی شناخته شده‌اند. نانوکریستال‌ها با توجه به ابعادشان و رفتاری که از خود نشان می‌دهند، به عنوان نمونه‌ای واقعی از سیستم‌های کوانتومی محدود شده به شمار می‌آیند. در فیزیک اتمی مواردی چون اتم‌های حبس شده در دام ژئولیت، اتم‌هایی که در قفس‌های فولرن گیر افتاده‌اند و نانو حباب‌های تشکیل شده در اطراف ذرات خارجی در محیط هلیوم مایع تحت فشار بالا در دیواره‌های راکتورهای اتمی،

هنگامی که اتم در فضایی متناسب با ابعادش محدود شده باشد، خواص متفاوتی نسبت به حالت آزاد از خود نشان می‌دهد. مواردی چون تغییر در اوربیتال‌های اتمی، ترازهای انرژی، چگونگی پر شدن پوسته‌های الکترونی، قطبش‌پذیری خطی و غیرخطی، فوتیونس/جذب فوتونی و ساختار فوق‌ریز، از جمله این خواص به‌شمار می‌آیند [۱]. بدیهی است که بررسی این تغییرات، توجه بسیاری از محققان علوم فیزیک و شیمی را به خود جلب نموده است.

در سال ۱۹۳۷، زمانی که میشل^۱ و همکاران تأثیر فشار بر اتم هیدروژن را مطالعه می‌نمودند [۲]، برای اولین بار به این فکر افتادند که برای ساده‌سازی حل مسئله، از مدل اتم در قفس

۱. Michels

شوئنبرگ^۲ در سال ۱۹۴۶ معرفی شدند. اولین کاربردهای توابع بی‌اسپلاین در فیزیک اتمی، توسط شار^۳، در ابتدای دهه ۱۹۷۰ نشان داده شد. در سال ۱۹۸۶، جانسون^۴ و همکاران به طور موفقیت‌آمیزی از بی‌اسپلاین‌ها در محاسبه تصحیحات مرتبه دوم و بالاتر، برای مطالعه ویژگی‌های اتم‌های سنگین استفاده نمودند. از آن زمان تاکنون، بی‌اسپلاین‌ها به طور وسیعی برای مطالعه ویژگی‌های گوناگون اتم‌ها و مولکول‌ها مورد استفاده قرار گرفته شده‌اند [۷، ۸]. طی چند سال اخیر، توابع بی‌اسپلاین در ناحیه وسیعی از کوانتوم، مکانیک جامدات، فیزیک مولکولی، اتمی و هسته‌ای، توسعه یافته‌اند. این توابع به طور گسترده‌ای برای حل مسائل فوتوایونش اتمی و مولکولی، به کار گرفته شده‌اند [۹-۱۳].

بی‌اسپلاین‌ها توابع پایه انتگرال‌پذیر مجذوری هستند که در یک فضای محدود (که معمولاً آن را جعبه می‌نامند) تعریف شده‌اند. جایگزیدگی بالا، انعطاف‌پذیری و پایداری عددی از خصوصیات مهم این توابع به شمار می‌آید. از ویژگی‌های دیگر بی‌اسپلاین‌ها این است که با تعداد نسبتاً کمی از توابع پایه، به اندازه کافی کامل هستند و می‌توان از وابستگی خطی آن‌ها حتی برای تعداد زیادی از پایه‌ها، صرف‌نظر نمود. ویژگی کامل بودن دسته‌پایه‌های بی‌اسپلاین، مخصوصاً برای توصیف حالت‌های پیوسته و مسائلی که در آن‌ها تمام طیف مورد نیاز است، یک ویژگی ایده‌آل به شمار می‌آید [۷].

یک بی‌اسپلاین $B_{i,k}(r)$ با مرتبه $k > 0$ و یک دسته از نقاط $\{t_i\}$ معروف به رشته گرهی، توسط رابطه بازگشتی زیر تعیین می‌شود:

$$B_{i,k}(r) = \frac{r-t_i}{t_{i+k-1}-t_i} B_{i,k-1}(r) + \frac{t_{i+k}-r}{t_{i+k}-t_{i+1}} B_{i+1,k-1}(r) \quad (1)$$

$$B_{i,1}(r) = \begin{cases} 1 & ; \quad t_i \leq r < t_{i+1} \\ 0 & ; \quad \text{در غیر این صورت} \end{cases} \quad (2)$$

$B_{i,k}(r)$ یک چند جمله‌ای قطعه‌ای از درجه $k-1$ است که تنها در بازه $t_i \leq r < t_{i+k}$ غیر صفر می‌باشد. این ویژگی جایگزیدگی

موارد خوبی از سیستم‌های کوانتومی محدود شده به شمار می‌آیند [۳ و ۴]. مدل قفس همچنین برای طراحی قسمت‌های درونی سیاره‌های گول‌پیکر مشتری و زحل، به کار گرفته شده است [۵].

اتم هیدروژن در مقایسه با سایر اتم‌ها ساختار ساده‌تری دارد. ساختار ساده این اتم باعث شده که در اکثر مطالعات بنیادی صورت گرفته روی عناصر، همواره به عنوان اولین انتخاب در نظر گرفته شود. در زمینه مطالعه سیستم‌های کوانتومی محدود شده نیز با توجه به سادگی مسئله اتم هیدروژن محدود شده و کاربردهای فراوان نتایج حاصل از آن، تاکنون مطالعات بسیاری روی این اتم انجام شده است [۶]. مدل اتم هیدروژن محدود شده در کاواک کرووی، به طور وسیعی در فیزیک نیمه رساناها مورد استفاده قرار می‌گیرد. این مدل قادر است به نحو بسیار مطلوبی، رفتار بخشنده هیدروژن مانند محدود شده در نقطه کوانتومی را شرح دهد. برای حل این مسئله، روش وردشی دقیقی با استفاده از دسته پایه‌های بی‌اسپلاین^۱، نمایش داده شده است. طیف انرژی برای کاواک‌هایی با ابعاد مختلف مورد بررسی قرار گرفته شده است. به دلیل ویژگی‌های خاص بی‌اسپلاین‌ها، همگرایی بسیار خوبی در نتایج مشاهده می‌گردد. طی تمامی محاسبات از واحدهای اتمی به صورت $m_e = \hbar = e = 1$ استفاده می‌شود.

در این مقاله، ابتدا در بخش ۲ با توابع بی‌اسپلاین آشنا می‌شویم. سپس در بخش ۳ روش حل مسئله را شرح می‌دهیم. بخش ۴ نیز به ارائه نتایج، ارزیابی و تحلیل آن‌ها، اختصاص داده شده است.

یکی از مهم‌ترین پیشرفت‌ها در زمینه فیزیک محاسباتی اتمی و مولکولی در سال‌های اخیر، ورود دسته پایه‌های بی‌اسپلاین در محاسبات مربوط به دینامیک و ساختار اتم‌ها و مولکول‌ها بوده است. بی‌اسپلاین‌ها نوع خاصی از توابع چند جمله‌ای قطعه‌ای هستند که به طور رسمی برای اولین بار در ریاضیات، توسط

۲. Shoenberg

۳. Shore

۴. Johnson

۱. B-spline

در این رابطه قسمت زاویه‌ای تابع موج نسبت به تابع موج اتم آزاد، تغییر نکرده است. تابع شعاعی $u_{n,l}(r)$ ، حل معادله شرودینگر کاهش یافته زیر می‌باشد:

$$\left[\frac{-d^2}{2dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{1}{r} \right] u_{n,l}(r) = E_{n,l} u_{n,l}(r). \quad (7)$$

از روش وردشی برای حل این مسئله استفاده می‌کنیم. برای این منظور ابتدا $u_{n,l}(r)$ را در فضای دسته پایه‌های بی اسپلین بسط می‌دهیم:

$$u_{n,l}(r) = \sum_{i=1}^N c_i^{nl} B_{i,k}(r), \quad (8)$$

در این رابطه $B_{i,k}(r)$ ، i امین بی اسپلین از مرتبه k می‌باشد. N تعداد توابع پایه بی اسپلین است که برای بسط تابع موج شعاعی به کار گرفته شده است. اکنون تابع موج شعاعی شرودینگر را وردش می‌دهیم:

$$\left\langle \left(\frac{-d^2}{2dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{1}{r} - E_{n,l} \right) u_{n,l}, B_j(r) \right\rangle = 0, \quad (9)$$

$$j = 1, \dots, N$$

رابطه فوق، شرط تعامد پایه‌ها را برقرار می‌سازد. این رابطه به ازای یک $u_{n,l}$ ثابت، باید برای تمام توابع آزمون $B_j(r)$ ، برقرار باشد. $E_{n,l}$ یک ضریب لاگرانژ است که قید نرمال بودن تابع موج را تضمین می‌کند. فرم انتگرالی رابطه (۹) به این صورت می‌باشد:

$$\sum_{i=1}^N c_i^{nl} \int_0^R \left[\frac{1}{2} \frac{dB_i(r)}{dr} \frac{dB_j(r)}{dr} + \left(\frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{1}{r} - E \right) B_i(r) B_j(r) \right] dr = 0, \quad (10)$$

$$j = 1, \dots, N$$

که برای به دست آوردن آن، از انتگرال گیری جزء به جزء استفاده شده است. رابطه (۱۰)، در واقع یک معادله ویژه مقدری تعمیم یافته، به شکل زیر می‌باشد:

$$H_l c = E S c, \quad (11)$$

S و H_l به ترتیب ماتریس‌های هامیلتونی و همپوشانی هستند. اندیس l برای هامیلتونی، نشان دهنده این مطلب است که هامیلتونی برای یک l معین نوشته شده است. تشکیل شدن ماتریس همپوشانی از این واقعیت ناشی می‌شود که

بالای بی اسپلین‌ها را نشان می‌دهد. نیازی نیست گره‌ها هم فاصله باشند و شکل $B(x)$ با تغییر گره‌ها، به طور روان تغییر می‌کند. گره‌ها نقاطی هستند که به طور یکنواخت یا غیریکنواخت و غیر کاهشی، روی بازه خاصی در امتداد محور r توزیع شده‌اند، به طوری که:

$$t_1 \leq t_2 \leq t_3 \leq \dots \leq t_{N+k} \quad (3)$$

در این رابطه، N تعداد توابع پایه بی اسپلین است.

یکی از مزایای بی اسپلین‌ها آن است که برای چینش گره‌ها آزادی عمل زیادی داریم. گره‌ها می‌توانند در فواصل مختلفی نسبت به یکدیگر واقع شوند و حتی می‌توانند روی یکدیگر قرار بگیرند (تعدد گره‌ها). البته با قرار گرفتن هر گره روی گره مجاور خود، درجه پیوستگی تابع اسپلین در آن نقطه، یک واحد کاهش می‌یابد. برای برقراری شرایط مرزی، از تکنیک تعدد گره‌ها در مرزها استفاده می‌شود.

حالتی را در نظر می‌گیریم که در آن هسته به حالت سکون، در مرکز کره‌ای به شعاع R واقع شده باشد. الکترون می‌تواند هر جایی داخل کره قرار داشته باشد و آزادانه حرکت کند ولی هرگز از سطح کره خارج نمی‌شود، یعنی تابع موج الکترون خارج کره صفر خواهد بود. به دلیل اعمال محدودیت بر سیستم، پتانسیل محدود کننده مربوط به قفس کروی سخت به صورت زیر بر سیستم اعمال می‌گردد:

$$V_{conf}(r) = \begin{cases} 0 & \text{اگر } 0 \leq r < R \\ \infty & \text{اگر } r \geq R \end{cases} \quad (4)$$

یک ویژه حالت انرژی $\Psi(\vec{r})$ با انرژی E که توصیف کننده یک اتم تک الکترونی است، یک حل از معادله شرودینگر زیر می‌باشد:

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}). \quad (5)$$

با توجه به تقارن مسئله، متداول است که متغیر شعاعی را جداسازی نموده و حلی به صورت زیر برای معادله شرودینگر پیدا کنیم:

$$\Psi_{n,l,m}(\vec{r}) = \frac{u_{n,l}(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (6)$$

جدول ۱. نمایش روند همگرایی ویژه مقادیر انرژی برای کاواک کروی با شعاع ۱ بور.

تراز انرژی (E_{nl})	پایه ۶	پایه ۸	پایه ۱۰	پایه ۱۵
E_{10}	۲/۳۷۳۹۹۰۸۱۰۶	۲/۳۷۳۹۹۰۷۹۰۵	۲/۳۷۳۹۹۰۷۸۷۷	۲/۳۷۳۹۹۰۷۸۶۲
E_{21}	۸/۲۲۳۱۴۰۰۳۳۰	۸/۲۲۳۱۳۸۴۰۵۳	۸/۲۲۳۱۳۸۳۸۲۷	۸/۲۲۳۱۳۸۳۸۱۶
E_{32}	۱۴/۹۶۷۴۷۰۱۳۲۲	۱۴/۹۶۷۴۶۴۶۹۹۵	۱۴/۹۶۷۴۶۴۳۰۴۹	۱۴/۹۶۷۴۶۴۲۹۹۰
E_{40}	۱۶/۵۷۰۲۹۷۰۱۶۲	۱۶/۵۷۰۲۵۷۶۸۸۷	۱۶/۵۷۰۲۵۶۰۲۸۱	۱۶/۵۷۰۲۵۵۹۹۹۴
E_{43}	۲۲/۸۹۶۶۲۶۴۵۷۴	۲۲/۸۹۵۸۴۰۶۳۱۹	۲۲/۸۹۵۸۲۵۹۷۶۶	۲۲/۸۹۵۸۲۵۸۷۳۳
E_{31}	۲۷/۴۷۷۵۰۲۲۲۸۳	۲۷/۴۷۴۰۸۴۷۸۶۱	۲۷/۴۷۳۹۹۶۵۰۶۲	۲۷/۴۷۳۹۹۵۴۵۵۷
E_{54}	۳۲/۰۴۱۹۱۴۵۳۷۱	۳۲/۰۳۴۲۸۳۱۸۴۲	۳۲/۰۳۴۰۹۰۵۲۷۸	۳۲/۰۳۴۰۸۹۷۱۵۰
E_{42}	۳۹/۳۹۸۲۴۳۵۱۴۳	۳۹/۳۱۷۸۴۶۳۶۵۶	۳۹/۳۱۵۳۳۴۶۴۵۹	۳۹/۳۱۵۳۲۰۲۴۲۰
E_{30}	۴۰/۹۸۷۷۹۴۲۵۳۷	۴۰/۸۶۷۷۶۰۸۳۶۲	۴۰/۸۶۳۱۵۶۵۲۵۶	۴۰/۸۶۳۱۲۴۵۰۵۰

در جدول‌های ۲ و ۳ مقادیر انرژی برای حالت پایه و چند حالت برانگیخته اول برای شعاع‌های مختلف آورده شده است. در حال حاضر دقیق‌ترین نتایج موجود برای ویژه مقادیر انرژی اتم هیدروژن در مرکز کاواک کروی، مربوط به کاری است که توسط آکینو^۱ و همکاران انجام شده است [۱۵]، به همین دلیل نتایج به دست آمده در حد امکان با نتایج آن‌ها مقایسه شده است. اعدادی که در این دو جدول ۲ و ۳ داخل پرانتز آورده شده‌اند، مربوط به کار آکینو و همکاران می‌باشد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج به دست آمده با دقت بسیار خوبی با نتایج آکینو و همکاران مطابقت دارد.

در جدول ۴ مقادیر انرژی برای چهار شعاع مختلف با اعداد کوانتومی n و l گوناگون ثبت شده است. مشاهده می‌شود که هر چه مقدار محدودیت وارد بر اتم بیشتر باشد ویژه مقادیر انرژی به سمت اعداد بزرگ‌تر میل می‌کنند. این مطلب، اولین تأثیر محدودیت بر ترازهای انرژی را نشان می‌دهد. در حد شعاع‌های بزرگ حدود ۱۰ بور، ویژه مقادیر انرژی به طور یکنواخت به سمت ویژه مقادیر انرژی اتم هیدروژن آزاد میل می‌کنند و در واقع در این شعاع‌ها اتم هیدروژن محدودیت را احساس نمی‌کند. این موضوع را می‌توان به خوبی در شکل ۱ مشاهده نمود. در این شکل تغییرات انرژی سه حالت $1s$ ، $2s$ و

بی‌اسپلین‌ها یک دسته متعامد نرمال از توابع پایه را تشکیل نمی‌دهند. با حل معادله ویژه مقادیر، ویژه مقادیر و ویژه بردارهای هامیلتونی به دست خواهد آمد [۴، ۷ و ۱۴].

برای حل این مسئله از توابع پایه بی‌اسپلین مرتبه ۷ با توزیع گرهی زیر استفاده شده است:

$$0 = t_1 = \dots = t_k < t_{k+1} < \dots < t_{m-k+1} = \dots = t_m = R \quad (1-4)$$

t_i گره‌ها را نشان می‌دهد. m و k به ترتیب نشان دهنده تعداد کل گره‌ها و مرتبه توابع بی‌اسپلین هستند. همان‌طور که مشاهده می‌شود، روی مرزها تعداد گرهی k تایی داریم و سایر گره‌ها به طور یکنواخت توزیع می‌شوند.

برنامه مربوط به حل عددی مسئله به زبان فرترن نوشته شده و از زیربرنامه‌های کتابخانه‌های $ARPACK$ و $LAPACK$ برای انجام محاسبات ماتریسی مربوطه استفاده شده است. با وجود حجم بالای محاسبات، مدت زمان لازم برای اجرای برنامه تنها حدود چند ثانیه می‌باشد که این امر از ویژگی‌های مفید توابع بی‌اسپلین ناشی می‌شود.

در جدول ۱ روند همگرایی ویژه مقادیر انرژی برای قفس کروی با شعاع $1a.u.$ بررسی شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، ویژه مقادیر همگرایی بسیار خوبی دارند و این مطلب نشان دهنده کامل بودن دسته پایه‌های بی‌اسپلین می‌باشد.

۱. Aquino

جدول ۲. مقادیر به دست آمده برای پایین ترین ترازهای انرژی با $l=0$ برای شعاع های مختلف. مقادیر داخل پرانتز مربوط به کار آکینو و همکاران می باشد.

شعاع	E_{10}	E_{20}	E_{30}	E_{40}	E_{50}
۰/۵	۱۴/۷۴۷۹۶۹۸۷ (۱۴/۷۴۷۹۷۰۰۳)	۷۲/۶۷۲۰۳۹۰۰ (۷۲/۶۷۲۰۳۹۱۹)	۱۷۰/۵۸۵۱۶۳۹۸ (۱۷۰/۵۸۵۱۶۴۱۸)	۳۰۸/۱۹۷۲۴۷۲۷ (۳۰۸/۱۹۷۲۴۷۴۷)	۴۸۵/۴۱۱۱۱۹۱۶ (۴۸۵/۴۱۱۱۱۸۷۲)
۱	۲/۳۷۳۹۹۰۷۸ (۲/۳۷۳۹۹۰۸۶)	۱۶/۵۷۰۲۵۵۹۹ (۱۶/۵۷۰۲۵۶۰۹)	۴۰/۸۶۳۱۲۴۴۹ (۴۰/۸۶۳۱۲۴۶۰)	۷۵/۱۳۰۴۹۲۹۵ (۷۵/۱۳۰۴۹۳۰۶)	۱۱۹/۳۲۷۰۶۲۵۳ (۱۱۹/۳۲۷۰۶۲۴۹)
۱/۵	۰/۴۳۷۰۱۸۰۰ (۰/۴۳۷۰۱۸۰۶)	۶/۶۴۴۱۲۱۷۶ (۶/۶۴۴۱۲۱۸۲)	۱۷/۳۶۲۵۵۴۸۶ (۱۷/۳۶۲۵۵۴۹۳)	۳۲/۵۳۴۰۸۵۲۲ (۳۲/۵۳۴۰۸۵۲۹)	۵۲/۱۳۰۵۸۴۸۷ (۵۲/۱۳۰۵۸۴۸۹)
۲	-۰/۱۲۵۰۰۰۰۰۴ (-۰/۱۲۵۰۰۰۰۰۰)	۳/۳۲۷۵۰۹۱۰ (۳/۳۲۷۵۰۹۱۵)	۹/۳۱۴۱۵۰۳۸ (۹/۳۱۴۱۵۰۴۳)	۱۷/۸۱۶۰۹۳۴۴ (۱۷/۸۱۶۰۹۳۴۹)	۲۸/۸۱۳۵۰۵۶۹ (۲۸/۸۱۳۵۰۵۷۲)
۲/۵	-۰/۳۳۴۹۱۰۲۲ (-۰/۳۳۴۹۱۰۱۸)	۱/۸۶۵۴۸۰۱۴ (۱/۸۶۵۴۸۰۱۸)	۵/۶۷۰۱۶۱۲۶ (۵/۶۷۰۱۶۱۳۱)	۱۱/۰۹۱۲۲۲۸۵ (۱۱/۰۹۱۲۲۲۸۹)	۱۸/۱۱۳۳۹۶۵۵ (۱۸/۱۱۳۳۹۶۵۷)
۳	-۰/۴۲۳۹۶۷۳۲ (-۰/۴۲۳۹۶۷۲۸)	۱/۱۱۱۶۸۴۷۰ (۱/۱۱۱۶۸۴۷۳)	۳/۷۳۴۹۵۸۱۶ (۳/۷۳۴۹۵۸۱۹)	۷/۴۸۵۶۳۵۶۷ (۷/۴۸۵۶۳۵۷۱)	۱۲/۳۵۱۰۰۳۵۷ (۱۲/۳۵۱۰۰۳۶۰)
۴	-۰/۴۸۳۲۶۵۳۳ (-۰/۴۸۳۲۶۵۳۰)	۰/۴۲۰۲۳۵۶۰ (۰/۴۲۰۲۳۵۶۳)	۱/۸۷۲۷۰۲۰۳ (۱/۸۷۲۷۰۲۰۶)	۳/۹۶۶۴۷۶۵۲ (۳/۹۶۶۴۷۶۵۴)	۶/۶۹۰۶۸۹۶۲ (۶/۶۹۰۶۸۹۶۴)
۱۰	-۰/۴۹۹۹۹۹۲۹ (-۰/۴۹۹۹۹۹۲۶)	-۰/۱۱۲۸۰۶۲۱ (-۰/۱۱۲۸۰۶۲۱)	۰/۰۹۱۴۲۲۳۱ (۰/۰۹۱۴۲۲۳۲)	۰/۴۰۵۱۵۴۳۴ (۰/۴۰۵۱۵۴۳۵)	۰/۸۲۶۳۸۸۸۶ (۰/۸۲۶۳۸۸۸۷)

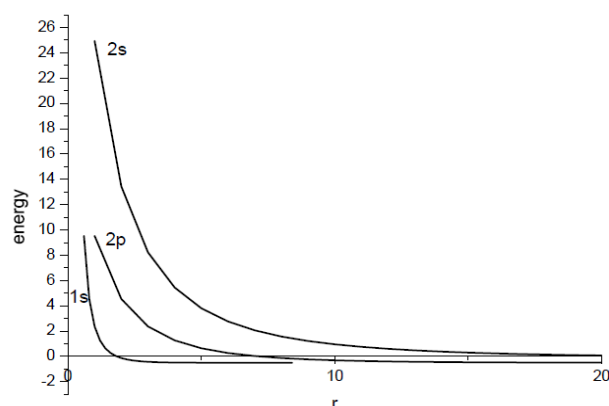
جدول ۳. مقادیر به دست آمده برای پایین ترین ترازهای انرژی با $l=1$ برای شعاع های مختلف. مقادیر داخل پرانتز مربوط به کار آکینو و همکاران می باشد.

شعاع	E_{21}	E_{31}
۰/۵	۳۶/۶۵۸۱۷۶۲۴ (۳۶/۶۵۸۱۷۵۸۸)	۱۱۴/۶۴۳۵۵۳۲۵ (۱۱۴/۶۴۳۵۵۲۵۱)
۱	۸/۲۲۳۱۳۸۳۸ (۸/۲۲۳۱۳۸۳۱)	۲۷/۴۷۳۹۹۵۴۵ (۲۷/۴۷۳۹۹۵۳۰)
۱/۵	۳/۲۳۱۰۵۱۴۲ (۳/۲۳۱۰۵۱۴۰)	۱۱/۶۷۹۵۷۳۱۶ (۱۱/۶۷۹۵۷۳۱۱)
۲	۱/۵۷۶۰۱۸۷۸ (۱/۵۷۶۰۱۸۷۸)	۶/۲۶۹۰۰۲۸۱ (۶/۲۶۹۰۰۲۷۹)
۲/۵	۰/۸۵۱۹۷۸۴۵ (۰/۸۵۱۹۷۸۴۶)	۳/۸۱۸۳۸۹۷۹ (۳/۸۱۸۳۸۹۷۹)
۳	۰/۴۸۱۲۵۰۳۰ (۰/۴۸۱۲۵۰۳۱)	۲/۵۱۶۲۰۹۰۵ (۲/۵۱۶۲۰۹۰۴)
۴	۰/۱۴۳۵۲۷۰۷ (۰/۱۴۳۵۲۷۰۸)	۱/۲۶۱۵۲۱۲۱ (۱/۲۶۱۵۲۱۲۱)
۱۰	-۰/۱۱۸۸۵۹۵۵ (-۰/۱۱۸۸۵۹۵۴)	۰/۰۴۹۱۹۰۷۵ (۰/۰۴۹۱۹۰۷۶)

جدول ۴. مقادیر ترازهای انرژی برای چهار شعاع متفاوت.

ترازهای انرژی	۰/۵	۲	۵	۱۰
E_{1_0}	۱۴/۷۴۷۹۶۹۸۷	-۰/۱۲۵۰۰۰۰۰۴	-۰/۴۹۶۴۱۷۰۳	-۰/۴۹۹۹۹۹۲۹
E_{2_0}	۷۲/۶۷۲۰۳۹۰۰	۳/۳۲۷۵۰۹۱۰	۰/۱۴۱۲۵۴۱۸	-۰/۱۱۲۸۰۶۲۱
E_{3_0}	۱۷۰/۵۸۵۱۶۳۹۸	۹/۳۱۴۱۵۰۳۸	۱/۰۵۳۲۲۰۵۹	۰/۰۹۱۴۲۲۳۱
E_{4_0}	۳۰۸/۱۹۷۲۴۷۲۷	۱۷/۸۱۶۰۹۳۴۴	۲/۳۸۲۳۲۵۱۶	۰/۴۰۵۱۵۲۳۴
E_{5_0}	۴۸۵/۴۱۱۱۱۹۱۶	۲۸/۸۱۳۵۰۵۶۹	۴/۱۱۷۵۷۸۲۹۷	۰/۸۲۶۳۸۸۸۶
E_{6_0}	۷۰۲/۱۸۲۳۴۷۳۵	۴۲/۲۹۶۶۸۴۷۹	۶/۲۵۴۷۷۱۳۶	۱/۳۵۱۱۲۰۷۳
E_{2_1}	۳۶/۶۵۸۸۷۶۲۴	۱/۵۷۶۰۱۸۷۸	۰/۰۰۷۵۹۳۹۱	-۰/۱۱۸۸۵۹۵۵
E_{3_1}	۱۱۴/۶۴۳۵۵۳۲۵	۶/۲۶۹۰۰۲۸۱	۰/۷۰۷۷۱۸۴۱	۰/۰۴۹۱۹۰۷۵
E_{4_1}	۲۳۲/۴۲۷۹۶۱۱۷	۱۳/۵۱۰۵۸۴۲۰	۱/۸۳۰۴۲۳۳۵	۰/۳۱۶۰۵۶۲۳
E_{5_1}	۳۸۹/۸۵۰۸۹۱۷۳	۲۳/۲۵۹۰۸۲۸۷	۳/۳۶۲۶۵۱۲۸	۰/۶۸۱۳۷۰۳۲
E_{6_1}	۵۸۶/۸۴۸۸۷۱۳۳	۳۵/۴۹۸۷۰۶۰۴	۵/۲۹۸۶۳۵۷۷	۱/۱۶۳۵۵۶۰۶
E_{2_2}	۶۳/۱۶۰۱۸۵۴۰	۳/۳۲۷۵۰۹۱۹	۰/۳۲۹۱۱۷۱۴	-۰/۰۰۷۰۹۲۷۸
E_{3_2}	۱۶۱/۳۵۷۰۰۸۲۴	۹/۳۱۴۱۵۰۵۱	۱/۲۳۹۶۵۱۰۲	۰/۲۰۲۴۴۲۸۸
E_{4_2}	۲۹۹/۰۶۴۷۱۷۷۵	۱۷/۸۱۶۰۹۳۶۲	۲/۵۶۷۱۷۷۸۲	۰/۵۲۱۳۴۸۰۹
E_{5_2}	۴۷۶/۳۲۳۴۹۸۹۹	۲۸/۸۱۳۵۰۵۹۰	۴/۳۰۱۳۲۰۱۳	۰/۹۴۴۷۲۴۰۰
E_{6_2}	۹۴/۶۲۶۵۹۹۳۹	۵/۳۴۲۰۹۴۴۷	۰/۶۶۹۴۵۱۹۸	۰/۰۸۱۲۴۱۵۹
E_{5_3}	۲۱۳/۳۱۰۴۴۹۰۱	۱۲/۶۳۱۰۴۷۹۱	۱/۷۹۴۵۲۰۸۹	۰/۳۵۲۵۸۴۱۷
E_{6_3}	۳۷۱/۰۵۳۱۵۴۵۶	۲۲/۳۹۷۲۰۴۷۹	۳/۰۳۲۷۶۶۹۱۱	۰/۷۲۳۸۴۹۳۸
E_{5_4}	۱۳۱/۰۲۴۶۲۰۷۶	۷/۶۴۶۶۷۵۱۲	۱/۰۴۸۶۸۸۲۲	۰/۱۸۸۳۴۱۸۷
E_{6_4}	۲۷۰/۵۲۳۵۸۵۲۷	۱۶/۲۵۲۲۸۱۶۰	۲/۳۸۹۲۹۸۶۶	۰/۵۰۸۳۵۳۰۱
E_{6_5}	۱۷۲/۲۸۴۷۵۸۳۲	۱۰/۲۴۵۹۷۰۴۶	۱/۴۷۱۶۱۴۵۸	۰/۲۹۷۴۰۸۱۵

که در واقع برابر با ترازهای انرژی اتم هیدروژن آزاد هستند. دومین تأثیر قفس این است که باعث افزایش فاصله بین ترازهای متوالی اتم نسبت به حالت آزاد آن، می‌گردد. این اثر را می‌توان در جدول ۵، برای سه تا از پایین‌ترین ترازها مشاهده نمود. همچنین قرار دادن اتم هیدروژن در قفس، باعث از بین رفتن تبهگنی ترازهای انرژی با شماره تراز یکسان و تکانه زاویه‌ای مختلف می‌گردد و با کاهش شعاع کره، اختلاف بین این ترازها بیشتر می‌شود. این مطلب در جدول‌های ۶ و ۷ نشان داده شده است [۱۶].



شکل ۱. تغییر انرژی حالت‌های 1s، 2s و 2p بر حسب شعاع کاواک.

ما با استفاده از یک روش وردشی مؤثر، معادله شرودینگر را برای اتم هیدروژن حبس شده در مرکز یک کاواک کروی حل

۲p نسبت به افزایش شعاع محدودیت رسم شده است. مشاهده می‌شود که برای شعاع‌های کوچک‌تر که نشان دهنده محدودیت بزرگ‌تر هستند، ترازهای انرژی مقادیر نسبتاً بزرگی دارند. با کاهش محدودیت، مقادیر ترازهای انرژی به سمت اعداد ثابتی میل می‌کنند.

جدول ۵. تغییرات انرژی بین دو تراز متوالی نسبت به افزایش شعاع.

شعاع کاواک	$E_1 - E_0$	$E_2 - E_1$
۲/۰	۱/۷۰۱۰۱۸۸۲	۱/۷۵۱۴۹۰۴۱
۳/۰	۰/۹۰۵۲۱۷۶۲	۰/۸۱۱۵۵۲۹۸
۴/۰	۰/۶۲۶۷۹۲۴	۰/۴۷۷۸۲۸۷۱
۱۰/۰	۰/۳۸۱۱۳۹۷۴	۰/۱۱۱۷۶۶۷۷
اتم هیدروژن آزاد	۰/۳۷۵	۰/۰۶۹۴۴۵

جدول ۶. جداشدگی تراز برانگیخته اول به دو تراز.

شعاع کره	$2s$	$2p$
۲/۰	۳/۳۲۷۵۰۹۱۰	۱/۵۷۶۰۱۸۷۸
۳/۰	۱/۱۱۱۶۸۴۷۰	۰/۴۸۱۲۵۰۳۰
۴/۰	۰/۴۲۰۲۳۵۶۰	۰/۱۴۳۵۲۷۰۷
۵/۰	۰/۱۴۱۲۵۴۱۸	۰/۰۰۷۵۹۳۹۱
۱۰/۰	-۰/۱۱۲۸۰۶۲۱	-۰/۱۱۸۸۵۹۵۵

جدول ۷. جداشدگی تراز برانگیخته دوم به سه تراز.

شعاع کره	$3s$	$3p$	$3d$
۲/۰	۹/۳۱۴۱۵۰۳۸	۶/۲۶۹۰۰۲۸۱	۳/۳۲۷۵۰۹۱۹
۳/۰	۳/۷۳۴۹۵۸۱۶	۲/۵۱۶۲۰۹۰۵	۱/۲۹۲۸۰۳۲۸
۴/۰	۱/۸۷۲۷۰۲۰۳	۱/۲۶۱۵۲۱۲۱	۰/۶۲۱۳۵۵۷۸
۵/۰	۱/۰۵۳۲۲۰۵۹	۰/۷۰۷۷۱۸۴۱	۰/۳۲۹۱۱۷۱۴
۱۰/۰	۰/۰۹۱۴۲۲۳۱	۰/۰۴۹۱۹۰۷۵	-۰/۰۰۷۰۹۲۷۸

پایه‌های بی اسپلین، روش به کار گرفته شده در این مقاله را می‌توان برای حل مسائل مختلف فیزیک کوانتومی به کار برد. این روش برای حل مسائلی که در آنها کاواک پتانسیل محدود معینی دارد، ناخالصی خارج از مرکز کاواک واقع شده و یا کاواک با اشکال غیر کروی، کاربرد دارد [۳].

اثرات مختلف محدودیت بر اتم را مورد مطالعه قرار دادیم. ویژه مقادیر انرژی با دقت بالا و هزینه محاسباتی کم به دست آمدند. صحت نتایج و ارزش روش به کار گرفته شده، با استفاده از آزمون‌های همگرایی و مقایسه با نتایج موجود، به خوبی تأیید شدند. در نهایت باید اشاره کرد که با توجه به قابلیت‌های بالای

3. S Kang, Q Liu, H Y Meng and T Y Shi, *Phys. Lett. A* **360** (2007) 608.
4. S H Patil, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34** (2001) 1049.

1. V K Dolmatov, A S Baltenkov, J P Connerade, and S T Manson, *Rad. Phys. and Chem.* **70** (2004) 417.
2. A Michels, J deBoer and A Bijl, *Physica* **4** (1937) 981.

11. W R Johnson, S A Blundell and J Sapirstein, *Phys. Rev. A* **37** (1988).
12. T K Fang and T N Chang, *Phys. Rev. A* **61** (2000).
13. C W McCurdy, and F Martin, *J. Phys. B: Mol. Opt. Phys.* **37** (2004) 917.
14. B Nine, O Haif-Khaif and A Zerarka, *Appl. Math. and Comp.*, **178** (2006) 486.
15. N Aquino, G Campoy, and H E Montgomery, *Wiley Periodicals, Inc. Int. J. Quantum Chem.* **107** (2007) 1548.
16. S Goldman and C Joslin, *J. Phys. Chem.* **96** (1992) 6021.
5. T Guillot, *Planet Space Sci.*, **47** (1999) 1183.
6. T Y Shi, H X Qiao and B W Li, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** (2000) L349.
7. H Bachau, E Cormier, P Decleva, J E Hansen and F Martin, *Rep. Prog. Phys.* **64** (2001) 1815.
8. W R Johnson and J Sapirstein, *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 1126.
9. T N Rescigno, W Vanroose, D A Horner, F Martin and C W McCurdy, *Lawrence Berkeley National Laboratory, Paper LBNL-61189* (2008).
10. J C Morrison and C Bottcher, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **26** (1993).

Archive of SID