

## محاسبه ترازهای انرژی معادلات شرودینگر خطی به روش سینک

خدیدجه نوروزی<sup>۱</sup>، سید محمد علی آل‌عمرانی نژاد<sup>۱\*</sup>، مهدی سلیمانی<sup>۲</sup>، بهناز فرنام<sup>۱</sup>

<sup>(۱)</sup> گروه ریاضی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی قم، قم، ایران

<sup>(۲)</sup> گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی قم، قم، ایران

تاریخ دریافت مقاله: ۹۵/۱۲/۱۰ تاریخ پذیرش مقاله: ۹۶/۰۴/۱۵

### چکیده

محاسبه انرژی‌های معادله شرودینگر در فیزیک از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. به عنوان مثال در محاسبه میزان جذب نور و میزان شکست نور در یک ماده، محاسبه انرژی‌های گذار بین زیرنواری و انرژی‌های گذار بین نواری، از ترازهای انرژی استفاده می‌کنیم. همچنین، به کمک ترازهای انرژی می‌توان چگالی حالات یک سیستم فیزیکی را یافت و از روی آن به دلیل عایق، نیم رسانا و یا فلز بودن یک ماده پی‌برد. روش‌های زیادی در خصوص محاسبه ترازهای انرژی وجود دارد که هر کدام از نقاط ضعف و قدرتی برخوردارند. روش‌های تکرار مجانبی، الگوریتم ژنتیک، نومروف، شبکه‌های عصبی، ماتریس انتقال و ... تعدادی از آنها می‌باشند. محاسبه ترازهای انرژی به کمک توابع سینک، کمتر مورد توجه دانشمندان این حوزه بوده است.

در این مقاله، کارایی روش هم محلی سینک در محاسبه این انرژی‌ها را بررسی کرده‌ایم. برای حل این مسائل، با استفاده از تقریب تابع مجهول به وسیله توابع سینک و به کمک روش هم محلی، مسئله را به یک مساله ویژه مقداری تبدیل می‌کنیم. در ادامه با بیان مثال‌هایی، دقت و سرعت این روش را با روش تفاضلات متناهی، که روشی رایج در بین فیزیکدانان است، مقایسه کرده‌ایم. در نهایت، با توجه به جداول و محاسبات انجام شده، دقت و سرعت این روش در مقایسه با برخی از روش‌ها، ثابت کرده‌ایم. تمامی محاسبات با نرم افزار میپل صورت گرفته است.

**واژه‌های کلیدی:** روش هم محلی سینک، روش تفاضلات متناهی، مقدار ویژه، بردار ویژه.

## ۱. مقدمه

معادله شرودینگر معادله‌ای است که چگونگی تغییر حالت کوانتومی یک سامانه فیزیکی با زمان و یا چگونگی توزیع احتمال حضور یک ذره در بازه بخصوصی از مکان را توصیف می‌کند. در حالت اول از یک معادله شرودینگر وابسته به زمان و در حالت دوم از یک معادله شرودینگر مستقل از زمان استفاده می‌کنیم.

مشابه قانون دوم نیوتن، در مکانیک کوانتومی، معادله شرودینگر برای یک سامانه کوانتومی نظیر اتم‌ها، مولکول‌ها، ذرات ریزاتمی نوشته می‌شود. منظور از سامانه کوانتومی سامانه‌ای است که با حل معادله شرودینگر برای آن، انرژی سامانه گسسته بدست آید. در اصل، معنی لغوی کوانتوم گسستگی است. این معادله یک معادله جبری ساده نیست ولی عموماً یک معادله دیفرانسیل جزئی است. در غیاب تعدادی از اثرات فیزیکی نظیر برهمکنش الکترون- الکترون این معادله خطی می‌باشد. با حل معادله دیفرانسیل جزئی مذکور تابع موج سیستم حاصل می‌شود که حالت کوانتومی یا بردار حالت نیز نامیده می‌شود.

در تفسیر استاندارد مکانیک کوانتومی، تابع موج کامل‌ترین توضیحی است که می‌توان در مورد یک سامانه فیزیکی داد. همانند قانون دوم نیوتن، معادله شرودینگر از لحاظ ریاضی می‌تواند به فرمول‌بندی‌های دیگر از جمله مکانیک ماتریسی ورنر هایزنبرگ و فرمول‌بندی انتگرال سطحی زیمان تبدیل شود.

در کل، معادله شرودینگر یک معادله وابسته به زمان است که با فرض جوابی به صورت ضرب یک تابع مجهول (تنها وابسته به مکان) در یک تابع نمایی (تنها تابعی از زمان) می‌توان با کمک روش جداسازی متغیرها نشان داد که تابع مجهول در معادله مستقل از زمان شرودینگر صدق می‌کند. معادله شرودینگر خطی مستقل از زمان به صورت زیر است:

$$\alpha \varphi''(x) + Q(x) \varphi'(x) + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (1)$$

که در اینجا  $\alpha = \frac{-\hbar^2}{2m}$  می‌باشد. جواب معادله باید در شرایط مرزی داده شده صدق کند (خود طبیعت این

شروط را تعیین می‌کند) و به صورت نرمال باشد. به این معنی که

$$\int \varphi^2(x) dx = 1.$$

شرط نرمال بودن بدلیل آن است که مجموع احتمالات یافتن ذره در کل مکان‌ها باید برابر یک باشد (همانطور که در بالا ذکر کردیم جواب معادله شرودینگر، احتمال حضور ذره را در یک بازه مکانی می‌دهد).

منظور از یافتن ترازهای انرژی، محاسبه مقدار  $E$ ، در معادله (۱) است. محاسبه ترازهای انرژی در فیزیک از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. به عنوان مثال در محاسبه میزان جذب نور، میزان شکست نور در یک ماده و محاسبه انرژی‌های گذار بین زیرنوری<sup>۱</sup>، از ترازهای انرژی استفاده می‌کنیم [۱]. همچنین، به کمک این ترازهای انرژی می‌توان چگالی حالات<sup>۲</sup> یک سیستم فیزیکی را یافت و از روی آن به دلیل عایق، نیمرسانا و یا فلز بودن یک ماده پی‌برد [۲]. روش‌های زیادی در خصوص محاسبه ترازهای انرژی وجود دارد که هر کدام از نقاط ضعف و قدرتی برخوردارند. روش‌های تکرار مجانبی<sup>۳</sup> [۳]، الگوریتم ژنتیک [۴]، نومروف [۵]، شبکه‌های عصبی<sup>۴</sup> [۶]، ماتریس انتقال<sup>۵</sup> [۷] و ... تعدادی از آنها می‌باشند.

در سال ۱۹۸۱، استنجر<sup>۶</sup> توابع سینک را برای تقریب یک تابع بیان و قضایای مربوط به این تقریب را بررسی کرد. پس از آن، بیالکی<sup>۷</sup> تقریب سینک را با به کارگیری روش هم محلی برای حل مسائل مقدار مرزی ارائه داد. روش سینک برای حل معادلات دیفرانسیل خطی و غیرخطی مورد توجه بسیاری از دانشمندان ریاضی می‌باشد [۸، ۹، ۱۰]. در این مقاله قصد داریم معادله شرودینگر خطی را توسط روش هم محلی سینک حل کنیم.

1. Inter subband transition energies
2. Density of States
3. asymptotic iteration method
4. neural networks
5. Transfer matrix method
6. Stenger
7. Bialecki

## ۲. تعریف‌ها و قضیه‌های اساسی

توابع سینک، توابعی متعامد در بازه‌ی  $(-\infty, \infty)$  هستند که قدرت آن‌ها در تقریب توابع مجهول در معادلات دیفرانسیل با مرتبه‌ی همگرایی نمایی است. تابع سینک به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\text{Sinc}(x) = \begin{cases} \frac{\sin(\pi x)}{\pi x}, & x \neq 0, \\ 1, & x = 0. \end{cases} \quad (2)$$

که  $k$  امین انتقال تابع سینک، با طول گام  $h$  به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$S_k(h, x) = \begin{cases} \frac{\sin(\frac{\pi}{h}(x - kh))}{h}, & x \neq kh, \\ 1, & x = kh. \end{cases} \quad (3)$$

همچنین در نقطه  $x = jh$  داریم:

$$S_k(h, jh) = \delta_{kj} = \begin{cases} 1, & j = k, \\ 0, & j \neq k. \end{cases}$$

تقریب سینک برای تابع  $f$  بصورت

$$f(x) \approx \sum_{k=-N}^N f(x_k) S_k(h, x) \quad (4)$$

تعریف می‌شود.

در حالتی که معادله در بازه  $(a, b)$  باشد، می‌توان از نگاشت‌های هموار برای انتقال معادله به بازه  $(-\infty, \infty)$  استفاده کرد. فرض کنید  $D$  یک دامنه‌ی پیوسته‌ی ساده روی اعداد مختلط و  $a$  و  $b$  دو نقطه‌ی مجزا از  $\partial D$  باشد. نگاشت یک به یک  $\phi$  از  $D$  به  $D_a = \{z \in C : |\text{Im} z| < d\}$  را طوری در نظر

می‌گیریم که  $\phi(a) = -\infty$  و  $\phi(b) = \infty$ . قرار دهید

$$\Gamma = \{z \in C : z = \psi(u), u \in R\}$$

که در اینجا  $\psi = \phi^{-1}$ . در این حالت برای عدد مثبت  $h$ ، گره‌ها به شکل

$$z_k = z_k(h) = \psi(kh) \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

می‌باشند. در ادامه تعریف‌ها و قضایای ضروری در محاسبه ترازهای انرژی را از مرجع [۸] بیان می‌کنیم.

## تعریف ۱. مجموعه تمام توابع تحلیلی روی $D$ که

$$\int_{\partial D} |f(z)| |dz| < \infty$$

را با  $H^1(D)$  نمایش می‌دهیم.

**قضیه ۱.** فرض کنید  $\phi' F \in H^1(D)$ ، در این صورت

$$\left| F(x) - \sum_{k=-\infty}^{\infty} F(x_k) S_k(h, \phi(x)) \right| \leq O\left(e^{-\frac{\pi d}{h}}\right).$$

**نتیجه.** برای تقریب تابع  $f$ ،  $f'$ ،  $f''$  و  $f''''$  می‌توان از روابط زیر استفاده کرد:

$$F(x) \approx \sum_{k=-N}^N F(x_k) S_k(h, \phi(x)), \quad (5)$$

$$F'(x) \approx \sum_{k=-N}^N F(x_k) \phi'(x) S'_k(h, \phi(x)), \quad (6)$$

$$F''(x) \approx$$

$$\sum_{k=-N}^N F(x_k) \left( (\phi'(x))^2 S''_k(h, \phi(x)) + \phi''(x) S'_k(h, \phi(x)) \right) \quad (7)$$

**قضیه ۲.** فرض کنید  $F \in H^1(D)$ ، در این صورت

$$\left| \int_{\Gamma} F(x) dx - h \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{F(x_k)}{\phi'(x_k)} \right| \leq O\left(e^{-\frac{\pi d}{h}}\right).$$

**نتیجه.** مقدار تقریبی انتگرال تابع  $F$  روی  $\Gamma$  از رابطه

$$\int_{\Gamma} F(x) dx \approx h \sum_{k=-N}^N \frac{F(x_k)}{\phi'(x_k)} \quad (8)$$

محاسبه می‌شود.

## ۳. محاسبه انرژی به روش هم محلی سینک

دامنه تابع  $\phi$  در معادله (۱)، با توجه به شرایط مسئله می‌تواند  $(-L, L)$ ،  $(0, \infty)$ ، و یا  $(-\infty, \infty)$  باشد. از طرفی توابع سینک روی بازه  $(-\infty, \infty)$  تعریف شده‌اند. برای کارآمدی روش، از تبدیلات جدول (۱) جهت انتقال مسئله از  $(-L, L)$  و  $(0, \infty)$  به  $(-\infty, \infty)$  استفاده می‌کنیم.

جدول شماره ۱. نگاشت‌های تبدیل بازه

$(a, b)$	$(-L, L)$	$(0, \infty)$
$\phi(x)$	$\ln\left(\frac{x+L}{L-x}\right)$	$\ln(\sinh(x))$
$\psi(x) = \phi^{-1}(x)$	$\frac{Le^x - L}{1 + e^x}$	$\ln(e^x + \sqrt{1 + e^{2x}})$
$x_j \equiv \psi(jh)$	$\frac{Le^{jh} - L}{1 + e^{jh}}$	$\ln(e^{jh} + \sqrt{1 + e^{2jh}})$

لذا با توجه به رابطه (۱۰)، ترازهای انرژی برابراند با مقادیر ویژه ماتریس

$$A = I_{i,j}^{(0)} + I_{i,j}^{(1)} + I_{i,j}^{(2)}.$$

برای محاسبه توابع مربوط به ترازهای انرژی، با استفاده از رابطه (۸) بردارهای ویژه را نرمال می‌کنیم.

#### ۴. مثال‌ها و مقایسه‌ها

**مثال ۱.** ترازهای انرژی معادله  $-\varphi''(x) = E\varphi(x)$  روی بازه  $(-1, 1)$  با شرایط مرزی  $\varphi(-1) = \varphi(1) = 0$  از رابطه‌های  $E_{2n} = \frac{(2n+1)^2}{4}\pi^2$  و  $E_{2n+1} = (n+1)^2\pi^2$  بدست می‌آیند. همچنین جواب‌های نرمال این معادله به صورت  $\varphi_{2n+1}(x) = \sin(n+1)\pi x$  و  $\varphi_{2n}(x) = \cos\frac{(2n+1)\pi x}{2}$  می‌باشند. این معادله مربوط به یک چاه کوانتومی بینهایت است. در واقع برای ساخت آن تنها کافی است چند ماده که دارای گاف‌های انرژی مختلفی هستند را در کنار هم روی یک صفحه مثلاً شیشه‌ای رشد دهیم. به عنوان مثال، چاه‌ی که با  $ZrO_2/SiO_xNy/n-Si$  ساخته شود را تقریباً می‌توان بینهایت در نظر گرفت [۱۱]. ترازهای انرژی اول تا پنجم بدست آمده از روش سینک و تفاضلات متناهی در جدول (۲)، با مقدارهای دقیق مقایسه شده‌اند.

با استفاده از رابطه (۴)، معادله (۱) به صورت:

$$\alpha \sum_{k=-N}^N \varphi(x_k) \left( (\phi'(x))^2 S_k''(h, \phi(x)) + \phi''(x) S_k'(h, \phi(x)) \right) + Q(x) \sum_{k=-N}^N \varphi(x_k) \phi'(x) S_k'(h, \phi(x)) + V(x) \sum_{j=-N}^N \varphi(x_j) S(j, h)(\phi(x)) = E \varphi(x_i) \quad (9)$$

تبدیل می‌شود. لذا رابطه (۹) در نقاط گره تبدیل به

$$\sum_{j=-M}^N [I_{i,j}^{(0)} + I_{i,j}^{(1)} + I_{i,j}^{(2)}] \varphi(x_j) = E \varphi(x_i) \quad (10)$$

می‌شود که در اینجا ماتریس‌های  $I_{i,j}^{(0)}$ ،  $I_{i,j}^{(1)}$  و  $I_{i,j}^{(2)}$  به صورت زیر می‌باشد:

$$I_{i,j}^{(0)} = V(x) \delta_{i,j}^{(0)}$$

$$I_{i,j}^{(1)} = \frac{1}{h} \alpha \phi''(x) \delta_{i,j}^{(1)}$$

$$I_{i,j}^{(2)} = \frac{1}{h^2} \alpha (\phi'(x))^2 \delta_{i,j}^{(2)}$$

$$\delta_{i,j}^{(0)} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

$$\delta_{i,j}^{(1)} = \begin{cases} 0 & i = j \\ \frac{(-1)^{j-i}}{j-i} & i \neq j \end{cases}$$

$$\delta_{i,j}^{(2)} = \begin{cases} -\frac{\pi^2}{3} & i = j, \\ \frac{2(-1)^{j-i+1}}{(j-i)^2} & i \neq j. \end{cases}$$

9

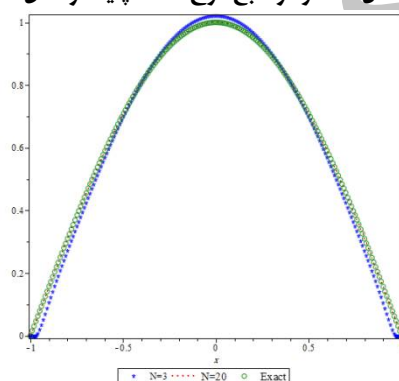
جدول شماره ۲. مقایسه نتایج بدست آمده از مثال ۱

انرژی‌ها	Sinc M (N =20)	FDM (N =20)	FDM (N =300)	Exact
$E_0$	۲.۴۶۹۹۱۵۶۵۶	۲.۲۴۴۳۷۲۰۶۵	۲.۴۵۱۰۱۱۳۹۲	۲.۴۶۷۴۰۱۱۰۱
$E_1$	۹.۸۷۹۶۶۵۵۳۶	۸.۹۳۱۷۹۹۳۱۸	۹.۸۰۳۷۷۸۵۷۰	۹.۸۶۹۶۰۴۴۰۴
$E_2$	۲۲.۲۲۹۲۴۸۳۸	۱۹.۹۲۶۱۴۵۰۲۴	۲۲.۰۵۷۵۰۰۵۷۰	۲۲.۲۰۶۶۰۹۹۱
$E_3$	۳۹.۵۱۸۶۵۱۸۷	۳۵.۰۰۳۵۹۶۰۱۰	۳۹.۲۱۰۸۴۲۵۴۵	۳۹.۴۷۸۴۱۷۶۲
$E_4$	۶۱.۷۴۶۰۰۱۸۴	۵۳.۸۵۷۲۱۸۸۵۵	۶۱.۲۶۱۹۳۵۹۱۷	۶۱.۶۸۵۰۲۷۵۲

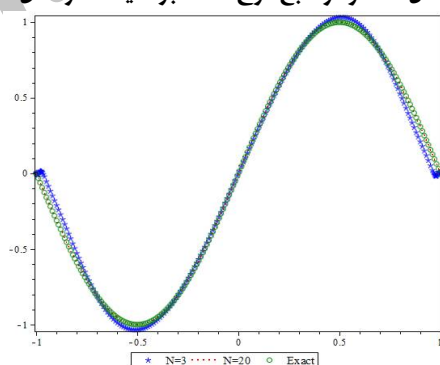
تقریبی تابع موج مربوط به انرژی حالت برانگیخته اول ( $E_1$ ) در شکل (۲) نشان داده شده است.

نمودارهای دقیق و تقریبی تابع موج مربوط به انرژی حالت پایه ( $E_0$ ) در شکل (۱) و نمودارهای دقیق و

شکل ۱. نمودار تابع موج حالت پایه در مثال ۱



شکل ۲. نمودار تابع موج حالت برانگیخته در مثال ۱



یک چاه سهمو فراهم می‌کند که می‌تواند الکترون‌ها را محصور کند و به دلیل نوع خاص تغییرات ترازهای انرژی آن، در بررسی ویژگی‌های نوری نانو ساختارهای نیم‌رسانا مورد توجه است [۱۲]. ترازهای انرژی این معادله برای

معادله  $-\frac{1}{2}\varphi''(x) + \frac{1}{2}\rho^2 x^2 \varphi(x) = E \varphi(x)$  مثال ۲ روی بازه  $(-\infty, \infty)$  در فیزیک به معادله شرودینگر نوسانگر هماهنگ معروف است. این پتانسیل  $(\frac{1}{2}\rho^2 x^2)$

می‌باشند که در اینجا  $H_n(x)$  چند جمله‌ای-های هرمیت هستند [۱۳]. ترازهای انرژی اول تا پنجم بدست آمده از روش سینک و تفاضلات متناهی در جدول (۳) با مقادیرهای دقیق مقایسه شده‌اند.

$$E_n = n + \frac{1}{2}$$

و جواب‌های آن به صورت

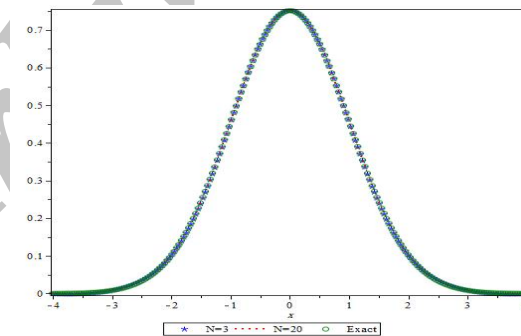
$$\varphi_n(x) = \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(x)$$

جدول شماره ۳. مقایسه نتایج بدست آمده از مثال ۲

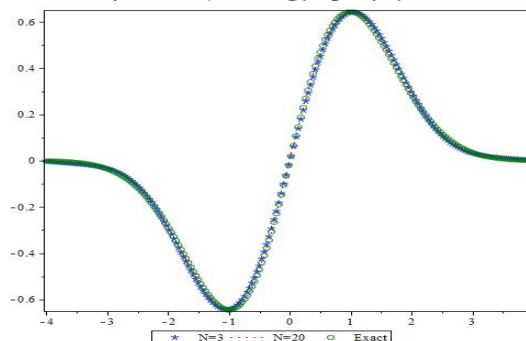
انرژی‌ها	Sinc Method (N=20)	FDM (N=20)	FDM (N=300)	Exact
$E_0$	۰.۴۹۹۹۹۹۹۸۶۴	۰.۵۵۳۶۷۷۴۷۵	۰.۴۹۹۵۰۰۸۸۶	۰.۵
$E_1$	۱.۴۹۹۹۹۹۹۹۸	۰.۸۶۰۰۹۷۱۵۱	۱.۴۹۷۵۰۲۴۲۸	۱.۵
$E_2$	۲.۴۹۹۹۹۹۹۹۵	۳.۹۷۳۶۷۹۲۸۰	۲.۴۹۳۵۰۰۴۷۸	۲.۵
$E_3$	۳.۵۰۰۰۰۰۰۰۰	۳.۹۷۴۳۶۰۲۵۶	۳.۴۸۷۴۸۸۹۴۸	۳.۵
$E_4$	۴.۵۰۰۰۰۰۰۰۰۷	۱۰.۴۸۴۱۲۳۰۵۸	۴.۴۷۹۴۶۱۶۹۰	۴.۵

نمودارهای دقیق و تقریبی تابع موج مربوط به انرژی حالت پایه  $(E_0)$  در شکل (۳) و نمودارهای دقیق و تقریبی تابع موج مربوط به انرژی حالت برانگیخته اول  $(E_1)$  در شکل (۴) نشان داده شده است.

شکل ۳. نمودار تابع موج حالت پایه در مثال ۲



شکل ۴. نمودار تابع موج حالت برانگیخته در مثال ۲



## مثال ۳. معادله

[۱۴] و حل تحلیلی دقیق ندارد. مقدار تقریبی بدست

آمده از مرجع [۱۴] برابر است با

$$E_n \approx \frac{1}{2} \omega_c m + \omega_c \left( n + \frac{|m|+1}{2} \right) \sqrt{1 + 4 \left( \frac{\omega}{\omega_c} \right)^2}. \quad (11)$$

ترازهای انرژی اول تا پنجم بدست آمده از روش سینک و روش تفاضلات متناهی برای  $m = \omega_c = \omega = 1$  در جدول (۴) برای با مقادیرهای بدست آمده از رابطه (۱۱) مقایسه شده‌اند.

$$-\frac{1}{2} \varphi''(x) - \frac{1}{2x} \varphi'(x) + \frac{1}{2} \left( \frac{\Omega^2 x^2}{4} + m\omega + \frac{m^2}{x^2} \right) \varphi(x) = E \psi(x)$$

روی بازه  $(0, \infty)$  که  $\Omega = \sqrt{\omega_c^2 + 4\omega^2}$  هنگام بررسی ویژگی‌های نوری یک نقطه کوانتومی استوانه‌ای قرار داده شده در میدان مغناطیسی خارجی بدست می‌آید

جدول شماره ۴. مقایسه نتایج بدست آمده از مثال ۳

انرژی‌ها	Sinc Method (N=20)	FDM (N=300)	رابطه (۱۱)
$E_0$	۲.۷۳۶۰۶۸۱۵۷	۲.۱۱۷۲۹۴۴۶۹	۲.۷۳۶۰۶۷۹۷۷
$E_1$	۴.۹۷۲۱۳۶۴۸۹	۴.۷۸۵۵۳۴۲۷۷	۴.۹۷۲۱۳۵۹۵۴
$E_2$	۷.۲۰۸۲۰۵۴۴۹	۷.۲۶۷۹۶۸۹۸۱	۷.۲۰۸۲۰۳۹۳۱
$E_3$	۹.۴۴۴۲۷۴۳۱۰	۹.۶۵۴۹۴۷۰۷۶	۹.۴۴۴۲۷۱۹۰۸
$E_4$	۱۱.۶۸۰۳۲۸۸۳	۱۱.۹۷۴۰۹۱۱۵۵	۱۱.۶۸۰۳۳۹۸۸

## مثال ۴. معادله

کوانتومی با سه الکترون است [۱۵]. با تغییر تعداد الکترونهای موجود در ساختار کوانتومی، معادله حاکم بر آن نیز عوض می‌شود. ترازهای انرژی اول تا پنجم بدست آمده از روش سینک برای  $m=0$  در حالت‌های  $R=1$  و  $R=0$  به ترتیب در جدول‌های (۵) و (۶) با روش تفاضلات متناهی مقایسه شده‌اند.

$$-2\varphi''(x) + 2 \left( x^2 + \frac{2R}{\sqrt{3}x} + \frac{m^2 - 0.25}{x^2} \right) \varphi(x) = E \varphi(x)$$

روی بازه  $(0, \infty)$  مربوط به سیستم یک نقطه

جدول شماره ۵. مقایسه نتایج بدست آمده از مثال ۴ برای  $R=0$

انرژی‌ها	Sinc Method (N=20)	FDM (N=300)
$E_0$	۲.۲۴۸۷۳۰۶۱۵	۲.۴۴۰۰۶۴۱۶۱
$E_1$	۶.۲۶۴۰۱۵۲۲۱	۶.۴۵۵۸۳۴۵۹۷
$E_2$	۱۰.۲۷۲۶۰۱۲۲	۱۰.۴۳۰۵۲۵۰۵۵
$E_3$	۱۴.۲۷۸۶۷۴۴۱	۱۴.۴۳۷۵۰۱۹۴۸۷
$E_4$	۱۸.۲۸۳۳۸۴۵۹	۱۸.۲۹۲۳۷۹۰۶۸

جدول شماره ۶. مقایسه نتایج بدست آمده از مثال ۴ برای  $R=1$ 

انرژی‌ها	Sinc Method (N = 20)	FDM (N = 300)
$E_0$	۳,۷۶۰۰۴۲۱۷۷	۳,۸۲۴۰۵۳۰۳۰
$E_1$	۷,۵۲۴۰۷۰۹۸۶	۷,۶۰۶۰۶۰۲۳۵
$E_2$	۱۱,۳۸۷۱۳۹۸۴۲۲	۱۱,۴۴۹۱۱۹۸۰۵
$E_3$	۱۵,۲۹۴۹۱۲۸۶	۱۵,۳۰۵۹۳۳۸۵۹
$E_4$	۱۹,۲۲۷۱۴۳۸۵	۱۹,۱۵۹۳۱۸۴۷۰

### نتیجه‌گیری

در این مقاله، با توجه به قدرت روش‌های طیفی، کارایی روش هم محلی سینک در محاسبه این انرژی‌ها را بررسی کردیم. در ادامه با بیان مثال‌هایی، دقت و سرعت این روش را با روش تفاضلات متناهی، که روشی رایج بین دانشمندان علوم فیزیک است، مقایسه کردیم. در نهایت، جداول و محاسبات انجام شده، نشانگر این است که دقت و سرعت این روش در مقایسه با روش تفاضلات متناهی که روشی رایج بین دانشمندان فیزیک است، بیشتر است. نویسندگان این مقاله در تلاش هستند که مسائل پیچیده دیگر در علوم فیزیک را با روش سینک بررسی کنند.

Arhive



- [8] F. Stenger, Numerical methods based on Sinc and analytic functions, New York (NY): Springer-Verlag, (1993).
- [9] J. Lund, K. Bowers, Sinc methods for quadrature and differential equations, Philadelphia, (PA): SIAM, (1992).
- [10] M. Dehghan, A. Saadatmandi, The numerical solution of a nonlinear system of second-order boundary value problems using the sinc-collocation method, Mathematical and Computer Modelling 46 (2007) 1434–1441.
- [11] S. Sayan, R. A. Bartynski, X. Zhao, E. P. Gusev, D. Vanderbilt, M. Croft, M. Banaszak Holl, E. Garfunkel, Valence and conduction band offsets of a  $ZrO_2/SiO_xNy/n-Si$  CMOS gate stack: A combined photoemission and inverse photoemission study, phys. stat. sol. (b) 241(10) (2004) 2246–2252.
- [12] s. L. Chuang, D. Ahn, Optical transitions in a parabolic quantum well with an applied electric field analytical solutions, J. Appl. Phys. 65 (1955) 2822- 2826.
- [13] G. B. Arfken, H. J. Weber, F. E. Harris, Mathematical methods for physicists, A Comprehensive guide, Seventh Edition (2013).
- [14] S. M. Ikhidari, physica, M. Hamzavi, R. Sever, Spectra of cylindrical quantum dots: The effect of electrical and magnetic fields together with AB flux field, Physica B: Condensed Matter 407.23 (2012) 4523-4529.
- [15] H. Hassanabadi, H. Rahimov, An alternative method for spectrum of a three-electron-quantum dot, Physica B: Condensed Matter 406 (2012) 3070-3073.
- [1] U. Yesilgul, Linear and nonlinear intersubband optical absorption coefficients and refractive index changes in symmetric double semi-V-shaped quantum wells, Journal of Luminescence 132 (2012) 765 –773.
- [2] C. Perssona, R. Ahujaa, A. Ferreira da Silvab, B. Johansson, First-principle calculations of optical properties of wurtzite AlN and GaN, Journal of Crystal Growth 231 (2001) 407–414.
- [3] G. H. Nie, Analysis of non-linear behaviour of imperfect shallow spherical shells on pasternak foundation by the asymptotic iteration method, International Journal of Pressure Vessels and Piping 80 (2003) 229–235.
- [4] R. Saha, P. Chaudhury, S. P. Bhattacharyya, Direct solution of Schrödinger equation by genetic algorithm: test cases, Physics Letters A 291 (2001) 397–406.
- [5] Z. Kalogiratou, Th. Monovasilis, T.E. Simos, Numerical solution of the two-dimensional time independent Schrodinger equation with Numerov-type methods, Journal of Mathematical Chemistry, 37 (2005) 271-279.
- [6] Y. Shirvany, M. Hayati, R. Moradian, Numerical solution of the nonlinear Schrodinger equation by feedforward neural networks, communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation 13 (2008) 2132–2145.
- [7] Z. Cao, Q. Liu, Q. Shen, X. Dou, Y. Chen, Y. Ozaki, Quantization scheme for arbitrary one-dimensional potential wells, Physical Review A, 3 (2001) 054103- 054103-4.