بنام یگانه‌ی هستی

۱۰۱۸۲۲

مرکز تحصیلات تکمیلی در علوم پایه زنجان

محاسبه‌ی تقریبی طیف جرمی حالت مقیّد D—ذّره‌ها

۱۳۸۷ /۵/ ۲۸

پایان‌نامهٔ کارشناسی ارشد

سعید انصاری

دکتر امیر حسین فتح‌اللهی

مهر ۱۳۸۳

۱۰۱۸۶۶

قدردانی و تشکر

ابتدا از دکتر فتح‌اللهی بخاطر پذیرفتن سرپرستی این پایان نامه و راهنمایی‌هایشان تشکر می‌کنم.

از کلاس‌های درس دکتر شریعتی، دکتر خرمّی، دکتر لنگری و دکتر ثبوتی مطالب زیادی آموختم از آنها سپاسگزام.

در مرکز با افراد زیادی آشنا شدم که دوستان خوبی برایم بوده‌اند، از همکلاسی‌هایم، ورودی سال ۸۰، دانشجویان دکترا و دکترای پیوسته و سایر دوستانی که دوران تحصیل را با آنها با خاطره‌یی شیرین گذراندم ممنونم؛ از جمله یاد می‌کنم از علیرضا اکبری، مهدی حبیبی، جهانفر ابویی، بابک عبداللهی‌پور، قاسم اکسیری‌فرد،روحا... جعفری، جعفر مصطفوی امجد، مهدی مرادخانی، علیرضا مرادی، ابوالفضل جعفری، فرهاد زمانی، حسین ملک‌زاده، حسین محّمدزاده، محمدعلی ملکی، حسین حمزه‌پور، فرشید محمّد رفیعی، ایرج غلامی و فرهاد مبینی.

از خانم اسماعیلی، مسئول محترم آموزش، بخاطر مساعدت‌شان در انجام کارهای اداری و مهدی حبیبی بخاطر پی‌گیری کارهای پایان‌نامه‌ام تشکر می‌کنم.

در آخر، و البته مهمتر، از پدر و مادر مهربان و بزرگوارم که زحمات زیادی برایم کشیدند و همیشه حمایتم کرده‌اند از صمیم قلب سپاسگزارم.

چکیده

در این پایان‌نامه سعی داریم روش ماتریسی [1] را به عنوان یک روش تقریبی برای تعیین ویژه‌مقادیر هامیلتونی‌ـ حالت مقید D—ذره‌ها معرفی کنیم. به طور خلاصه، در این روش با استفاده از یک مجموعه بردار پایه، هامیلتونی به شکل ماتریسی نوشته می‌شود که با قطری کردن آن ویژه‌مقادیرِ هامیلتونی به دست می‌آید. برای آنکه نشان دهیم ویژه‌مقادیری که از این روش به دست می‌آیند دارای دقت قابل قبولی هستند در فصل اول روش *Shooting* را که یک روش استاندارد برای تعیین ویژه‌مقادیر سیستم‌های یک بعدی است مورد بررسی قرار می‌دهیم. به دلیل اینکه این روش برای مسائل دو و سه بعدی مناسب نیست در فصل دوم به روش تفاضل متناهی [2] و نحوه‌ی به کار گیری آن برای تعیین ویژه‌مقادیر در مسائل با بعد بیش از یک می‌پردازیم. در نهایت در فصل سوم روش ماتریسی را توضیح می‌دهیم.

از آنجا که در هامیلتونی موردنظر جملات ضربی‌ـ درجه دو از مختصات وجود دارند، مدل‌ـ اسباب بازی $V(x,y) = \lambda x^2 y^2$ برای مطالعه در نظر گرفته شده است.

واژه‌های کلیدی: حالت مقیّد D—ذره، ویژه مقدار، مکانیک کوانتمی

---

[1] Matrix Method

[2] Finite Difference

فهرست

چکیده . . . . . چهار

۱ پتانسیل D—ذرّه‌ها

۲ حل معادله‌ی شرودینگر با روش *Shooting*

۲.۱ مشتق عددی ۵

۲.۲ الگوریتم انتگرال‌گیری نُومِرُف ۸

۲.۳ روش Shooting برای تعیین ویژه‌مقادیر معادله‌ی شرودینگر یک بعدی ۹

۲.۳.۱ روش دو نیمی برای تعیین ریشه‌های یک تابع ۱۲

۲.۴ مثال : ذره در پتانسیل $V(x) = \lambda x^4$ ۱۴

۳ تعیین ویژه‌مقادیر با استفاده از روش تفاضل متناهی

۳.۱ روش تفاضل متناهی برای تعیین ویژه‌مقادیر معادله‌ی شرودینگر یک بعدی ۲۲

۳.۲ مثال برای معادله‌ی شرودینگر یک بعدی : ذره در پتانسیل $V(x) = \lambda\, x^4$ ۲۶

۳.۳ تعمیم به دو بعد ۲۷

۳.۴ مثال برای معادله‌ی شرودینگر دو بعدی : ذره در پتانسیل $V(x,y)=\lambda x^{۲}y^{۲}$ ۲۹

۴ حل عددی معادلات ویژه مقداری به روش ماتریسی

۴.۱ دید کلی از روش ۳۳

۴.۲ ارتباط اندازه‌ی ماتریس با ویژه‌مقادیر ۳۷

۴.۳ ویژه حالت‌های نوسانگر هماهنگ به عنوان بردارهای پایه ۴۲

۴.۴ تعمیم به سیستم‌های چند بعدی ۴۴

۴.۵ مثال برای سیستم یک بعدی : ذره در پتانسیل $V(x)=\lambda x^{۴}$ ۴۶

۴.۶ مثال برای سیستم دو بعدی : ذره در پتانسیل $V(x,y)=\lambda x^{۲}y^{۲}$ ۵۰

۵ نتیجه گیری

٦ پیوست‌ها

پیوست «الف» — برنامه‌ی فرترن برای محاسبه‌ی تراز انرژی ذره در پتانسیل $V(x,y)=\lambda x^{۴}$ — روش Shooting ۵۷

پیوست «ب» — برنامه‌ی فرترن برای محاسبه‌ی تراز انرژی ذره در پتانسیل $V(x,y)=\lambda x^{۴}$ — روش تفاضل متناهی ۵۹

پیوست «ج» — برنامه‌ی فرترن برای محاسبه‌ی تراز انرژی ذره در پتانسیل $V(x,y)=\lambda x^{۲}y^{۲}$ — روش تفاضل متناهی ٦۱

پیوست «د»— برنامه‌ی فرترن برای محاسبه‌ی تراز انرژی ذره در پتانسیل $V(x)=\lambda x^{۴}$ — روش ماتریسی ٦۴

پیوست «ه»— برنامه‌ی فرترن برای محاسبه‌ی تراز انرژی ذره در پتانسیل $V(x,y) = \lambda x^2 y^2$ —روش ماتریسی ٦٦

فصل اول

پتانسیل D—ذرّه‌ها

طبق نظریه ریسمان، D—غشأ ها موجوداتی p بعدی هستند که انتهای ریسمانها روی آنها حرکت می‌کنند. یکی از جنبه‌های جالب آنها در حالت مقیّد آنها ظاهر می‌شود.

حالت مقیّد D—غشأ با بعد صفر (که D—ذره نیز نامیده می‌شوند) یادآور تصویری است که برای کوارک‌ها در داخل باریون‌ها در نظر گرفته می‌شود. از آنجا که طبق نظریه‌های موجود، کوارک‌ها توسط QCD—ریسمانها در داخل باریون‌ها به هم مقیّد شده‌اند. جالب خواهد بود که ببینیم دینامیک حالت مقیّد D—ذره‌ها با آنچه که از QCD داریم هم‌خوانی دارد یا نه.

پتانسیلی که برای حالت مقیّد ذرّه‌ها-D در نظر می‌گیریم به صورت :

$$V(X) = \sum_{ij} [X_i, X_j]^2 \qquad i,j = 1,...,d$$

می‌باشد که d بعد فضا است و X_i و X_j ماتریس‌هایی هستند که مرتبه ی آنها وابسته به بعد فضا می باشد [1] .

ما برای سادگی مسئله را برای $d = 2$ حل می‌کنیم. از طرفی همانطور که میدانیم تعداد ماتریس‌های مستقل که در رابطهٔ جابجایی صدق می‌کنند برابر $d^2 - 1$ می‌باشد که در نتیجه برای دو بعد به سه تا از این ماتریس‌ها نیاز داریم.

می‌توان نوشت :

$$X_i = X_i^\alpha \sigma_\alpha \qquad\qquad \alpha = ۱, ۲, ۳$$

که در آن σ_α ها ماتریس و X_i^α ها عدد هستند. این تغییرات را در پتانسیل اعمال می‌کنیم.

$$[X_i, X_j] \;=\; \sum_{\alpha,\beta} [\sigma_\alpha, \sigma_\beta]\; X_i^\alpha X_j^\beta$$

از طرفی

$$[\sigma_\alpha, \sigma_\beta] = ۲i\, \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\, \sigma_\gamma$$

بنابراین می‌توان نوشت :

$$[X_i, X_j] \;=\; \sum_{\alpha\beta\gamma} ۲i\, \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\, X_i^\alpha X_j^\beta\, \sigma_\gamma$$

درنتیجه

$$[X_i, X_j]^۲ \;=\; \sum_{\alpha\beta\gamma}\sum_{\alpha'\beta'\gamma'} (۲i)^۲ \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\, \epsilon_{\alpha'\beta'\gamma'}\, X_i^\alpha X_j^\beta X_i^{\alpha'} X_j^{\beta'}\, \sigma_\gamma \sigma_{\gamma'}$$

و در نهایت

$$\begin{aligned} V(X) &= tr\Big(\sum_{ij}\sum_{\alpha\beta\gamma}\sum_{\alpha'\beta'\gamma'} (۲i)^۲ \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\, \epsilon_{\alpha'\beta'\gamma'}\, X_i^\alpha X_j^\beta X_i^{\alpha'} X_j^{\beta'}\, \sigma_\gamma \sigma_{\gamma'}\Big) \\ &= \sum_{ij}\sum_{\alpha\beta\gamma}\sum_{\alpha'\beta'\gamma'} (۲i)^۲ \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\, \epsilon_{\alpha'\beta'\gamma'}\, X_i^\alpha X_j^\beta X_i^{\alpha'} X_j^{\beta'}\, tr(\sigma_\gamma \sigma_{\gamma'}) \\ &= \sum_{ij}\sum_{\alpha\beta\gamma}\sum_{\alpha'\beta'\gamma'} (۲i)^۲ \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\, \epsilon_{\alpha'\beta'\gamma'}\, X_i^\alpha X_j^\beta X_i^{\alpha'} X_j^{\beta'}\, (۲\delta_{\gamma\gamma'}) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow\; V(X) = \sum_{ij}\sum_{\alpha\beta\gamma}\sum_{\alpha'\beta'\gamma} ۲(۲i)^۲ \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\, \epsilon_{\alpha'\beta'\gamma}\, X_i^\alpha X_j^\beta X_i^{\alpha'} X_j^{\beta'} \qquad (۱.۱)$$

با توجه به اینکه $i,j = ۱, ۲$ و $\alpha, \beta, \gamma = ۱, ۲, ۳$ بنابراین تعداد X_a^bها شش تا خواهد بود که می‌توان آنها بر

حسب شش جفت عملگر خلق و فنا نوشت . آنها به صورت زیر اسم گذاری می‌کنیم

$$X_1^1 = x_1 = \sqrt{\frac{1}{\omega_1}}\,(a_1^\dagger + a_1) \qquad X_2^1 = x_2 = \sqrt{\frac{1}{\omega_2}}(a_2^\dagger + a_2)$$
$$X_1^2 = x_3 = \sqrt{\frac{1}{\omega_3}}\,(a_3^\dagger + a_3) \qquad X_2^2 = x_4 = \sqrt{\frac{1}{\omega_4}}(a_4^\dagger + a_4)$$
$$X_1^3 = x_5 = \sqrt{\frac{1}{\omega_5}}\,(a_5^\dagger + a_5) \qquad X_2^3 = x_6 = \sqrt{\frac{1}{\omega_6}}(a_6^\dagger + a_6) \qquad (1.2)$$

البته با این فرض که $\hbar, 2m = 1$.

کار بعدی این خواهد بود که پتانسیل را بر حسب a و $a^\dagger$ ها بنویسیم. از رابطه‌ی (۱.۱) استفاده می‌کنیم، ابتدا جملات را بر حسب $\alpha, \beta, \gamma, \alpha', \beta', \gamma'$ بسط می دهیم:

$$\begin{aligned} V(X) = 2(2i)^2 \sum_{ij} \{&X_i^1 X_j^2 X_i^1 X_j^2 - X_i^1 X_j^2 X_i^2 X_j^1 - X_i^2 X_j^1 X_i^1 X_j^2 + X_i^2 X_j^1 X_i^2 X_j^1 \\ &+ X_i^1 X_j^3 X_i^1 X_j^3 - X_i^1 X_j^3 X_i^3 X_j^1 + X_i^2 X_j^3 X_i^2 X_j^3 - X_i^2 X_j^3 X_i^3 X_j^2 \\ &+ X_i^3 X_j^2 X_i^3 X_j^2 - X_i^3 X_j^2 X_i^2 X_j^3 - X_i^3 X_j^1 X_i^3 X_j^1 - X_i^3 X_j^1 X_i^1 X_j^3\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V(X) = 2(2i)^2 \sum_{ij} \{&(X_i^1 X_j^2)^2 + (X_i^2 X_j^1)^2 + (X_i^1 X_j^3)^2 + (X_i^2 X_j^3)^2 + (X_i^3 X_j^2)^2 \\ &- 2(X_i^1 X_i^2 X_j^1 X_j^2 + X_i^1 X_i^3 X_j^1 X_j^3 + X_i^2 X_i^3 X_j^3 X_j^3)\} \end{aligned}$$

برای بسط دادن بر حسب i و j جملات را به دو گروه $i = j$ و $i \neq j$ تقسیم می‌کنیم:

$$\begin{aligned} V(X) &= 2(2i)^2\{[(X_i^1 X_i^2)^2 + (X_i^2 X_i^1)^2 + (X_i^1 X_i^3)^2 + (X_i^2 X_i^3)^2 + (X_i^3 X_j^2)^2 \\ &- 2(X_i^1 X_i^2 X_i^1 X_i^2 + X_i^1 X_i^3 X_i^1 X_i^3 + X_i^2 X_i^3 X_i^3 X_i^3] + [...i \neq j]\} \end{aligned}$$

با توجه به اینکه X_a^bها مستقل از یکدیگر هستند می‌توان آنها را، در جاهایی که در هم ضرب شده‌اند، جابجا کرد در اینصورت جملات با i و j یکسان با هم ساده می‌شوند و فقط جملاتی که در آنها $i \neq j$ باقی می‌مانند.

در اینصورت پتانسیل به صورت زیر ساده می‌شود:

$$\begin{aligned} V(X) &= 4(2i)^2\{(X_1^1 X_2^2)^2 + (X_1^2 X_2^1)^2 + (X_1^1 X_2^3)^2 + (X_1^2 X_2^3)^2 + (X_1^3 X_2^1)^2 + (X_2^2 X_1^3)^2 \\ &- 2(X_1^1 X_1^2 X_2^1 X_2^2 + X_1^1 X_1^3 X_2^1 X_2^3 + X_1^2 X_1^3 X_2^3 X_2^3)\} \end{aligned}$$

اگر از تعریف (۱.۲) استفاده کنیم خواهیم داشت

$$\begin{aligned} V(X) &= 4(2i)^2\{(x_1x_4)^2+(x_3x_2)^2+(x_1x_6)^2+(x_3x_6)^2+(x_5x_2)^2+(x_4x_5)^2 \\ &- 2(x_1x_2x_3x_4+x_1x_2x_5x_6+x_3x_4x_5x_6)\} \end{aligned} \quad (1.3)$$

همانطور که مشاهده می‌کنیم پتانسیل به صورت جملات ضربی از مختصات به صورت $(x_ax_b)^2$ و $x_a\ x_b\ x_c\ x_d$ می‌باشد. بنابراین برای تعیین طیف جرمی باید به دنبال روشی باشیم که بتوان ویژه‌مقادیر هامیلتونی با چنین نوع پتانسیلی را به‌دست آورد.

ما در عمل این کار را برای یکی از جملات پتانسیل از نوع $(x_ax_b)^2$ انجام می‌دهیم که براحتی قابل تعمیم برای تمام جملات می‌باشد.

فصل دوم

حل معادله‌ی شرودینگر با روش *Shooting*

در این فصل روش Shooting برای تعیین ویژه‌مقادیر معادله‌ی شرودینگر یک بعدی ـ مستقل از زمان را مورد بررسی قرار خواهیم داد. برای پرداختن به این مسئله ابتدا نحوه تقریب زدن مشتق برای استفاده در روشهای عددی راتوضیح می‌دهیم. در ادامه الگوریتم نومرف برای انتگرال‌گیری ـ عددی از معادلات دیفرانسیل را معرفی خواهیم کرد. در قدم بعد و به عنوان هدف اصلی این فصل به روش Shooting می‌پردازیم. در نهایت نیز، برای آنکه نشان دهیم در عمل چگونه از این روش استفاده می‌شود، ویژه‌مقادیر ذره‌ای را که در پتانسیل $V(x) = \lambda x^4$ قرار دارد به دست می آوریم.

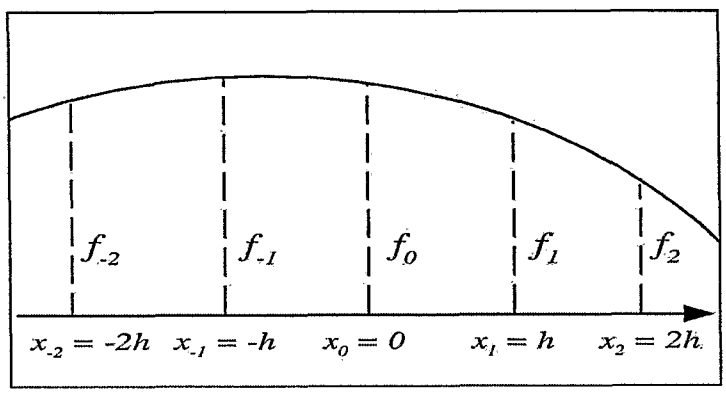
۲.۱ مشتق عددی

در این بخش به نحوه‌ی تقریب زدن مشتق گیری برای استفاده در روشهای عددی می‌پردازیم. ایده‌ی کلی این است که تابع ـ اصلی، f، را توسط تابعی دیگر (مانند چند جمله‌ای درجه‌ی یک یا دو) طوری تقریب بزنیم که عملی مانند مشتق گیری را به راحتی بتوان روی آن اعمال کرد. برای انجام این کار روشهای متفاوتی وجود دارد که در این جا یکی از آنها را بررسی و از آن استفاده می‌کنیم.

فرض کنید می‌خواهیم مشتق تابع ـ f را در نقطه‌ی $x = 0$، $f'(0)$، حساب کنیم (البته روابطی که به دست می آیند با عمل انتقال برای هر x دلخواه قابل تعمیم هستند.). همچنین فرض کنید که ما f را روی شبکه‌یی که فاصله‌ی نقاط آن یکی است [1] می‌دانیم، ما آنها را با f_n نمایش می‌دهیم که به صورت زیر تعریف می‌شوند

$$f_n \equiv f(x_n) \qquad x_n = nh(n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$$

که در آن h عدد ثابتی است که بیانگر فاصله‌ی بین نقاط شبکه است و ثابت شبکه نامیده می‌شود، شکل (۲.۱). هدف ما محاسبه‌ی تقریبی ـ مقدار $f'(0)$ بر حسب f_n ها است.



شکل ۲.۱.۱ تقریب زدن یک تابع با در نظر گرفتن شبکه‌ای از نقاط

از سری تیلور برای بسط تابع f در همسایگی ـ صفر استفاده می‌کنیم

$$f(x) = f_0 + xf' + \frac{x^2}{2!}f'' + \frac{x^3}{3!}f''' + \frac{x^4}{4!}f'''' + \ldots \qquad (۲.۱)$$

که تمام مشتق‌ها در $x = 0$ محاسبه می‌شوند.

اگر در بسط فوق x را برابر $+h$ و $-h$ قرار دهیم در این صورت داریم.

$$f_1 \equiv f(+h) = f_0 + hf' + \frac{h^2}{2}f'' + \frac{h^3}{6}f''' + \frac{h^4}{24}f'''' + O(h^5) \qquad (۲.۲)$$

$$f_{-1} \equiv f(-h) = f_0 - hf' + \frac{h^2}{2}f'' - \frac{h^3}{6}f''' + \frac{h^4}{24}f'''' + O(h^5) \qquad (۲.۳)$$

[1] *Equally spaced lattice*

منظور از $O(h^5)$ جملات از مرتبه‌ی h^5 و مرتبه‌های بالاتر است.(می‌توانیم فرض کنیم که تابع f و مشتق آن دارای یک مرتبه‌ی بزرگی است)

با استفاده از رابطه‌ی بالا می‌توان f' را بر حسب f_1 و f_{-1} نوشت

$$f' = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} - \frac{h^3}{6} f''' + O(h^5)$$

با فرض اینکه h کوچک است می‌توان از جمله‌ی شامل f''' و جملات مرتبه‌ی h^5 و بالاتر صرفه‌نظر کرد. بنابراین f' تنها با جمله‌ی اول تقریب زده می‌شود. یعنی

$$f' \approx \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} \qquad (2.4)$$

خطای حاصل از صرفه‌نظر کردن از جملات مرتبه‌ی h^3 و بالاتر را می‌توان با هرچه کوچکتر کردن مقدار h، کمتر و کمتر کرد و این یعنی کم کردن هرچه بیشتر فاصله‌ی نقاط شبکه و نزدیکتر شدن به فضای پیوسته.

رابطه‌ی (۲.۴) را به علت اینکه برای مشتق گیری از بازه‌ی سه نقطه‌یی ـ $[-h, h]$ استفاده می‌کند، فرمول تفاضل سه نقطه‌ای[۲] برای مشتق مرتبه‌ی اول می‌نامند.

به منظور تعمیم رابطه‌ی به دست آمده برای هر نقطه‌ای از شبکه تنها کافیست در (۲.۱) بسط را بجای $x = 0$ حول نقطه‌ی دلخواه $x = x_n$ بنویسیم که در این صورت مشتق در x_n از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید.

$$f'_n \equiv f'(x_n) \approx \frac{f_{n+1} - f_{n-1}}{2h} \qquad (2.5)$$

آنچه که در بالا برای مشتق اول انجام دادیم به راحتی برای مشتق مرتبه‌های بالاتر نیز قابل انجام است. برای مثال مشتق دوم ـ f، f''، را می‌توان با جمع کردن دو رابطه‌ی (۲.۲) و (۲.۳) تعیین کرد.

$$f_1 + f_{-1} = 2f_0 + h^2 f'' + \frac{h^4}{12} f'''' + O(h^6)$$

$$\rightarrow \; f'' \approx \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12} f''''$$

[۲] *Three point difference*

که مشتق‌ها در نقطه‌ی $x = 0$ محاسبه می‌شوند. در اینجا نیز از جملات مرتبه‌ی چهارم و بالاتر h صرفه‌نظر کرده‌ایم.

تعمیم رابطه‌ی فوق برای محاسبه‌ی مشتق در هر نقطه‌ی دلخواهی نیز به صورت زیر است

$$f''_n \equiv f''(x_n) \approx \frac{f_{n+1} - 2f_n + f_{n-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12} f''''_n \qquad (2.6)$$

که این تقریب هم از نوع تفاضل سه نقطه‌ای است.

۲.۲ الگوریتم انتگرال‌گیری نُومِرُف

معادله‌ی دیفرانسیل مرتبه‌ی دوم همگن زیر را در نظر بگیرید.

$$\frac{d^2y}{dx^2} + k^2(x)y = 0 \qquad (2.7)$$

که در آن k^2 تابعی حقیقی است.

روش ساده و مؤثری برای انتگرال گیری معادلات دیفرانسیلی که شکلی به صورت (۲.۷) دارند، وجود دارد که به روش نومرف [3] معروف است. ما در این بخش این روش را توضیح می‌دهیم.

ابتدا مشتق مرتبه‌ی دوم در(۲.۷) را با استفاده از فرمول تفاضل سه نقطه‌ای [4] (۲.۶) ، که در بخش قبل آن را توضیح دادیم، تقریب می‌زنیم. از (۲.۶) داریم

$$y''_n \approx \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12} y''''_n \qquad (2.8)$$

که y''''_n را می‌توان از خود معادله‌ی دیفرانسیل به صورت زیر حساب کرد

$$y''''_n = \frac{d^2}{dx^2}(-k^2 y)\Big|_{x=x_n} \qquad (2.9)$$

---

[3] *Numerov method*

[4] *Three point difference*

$$= -\frac{(k^2y)_{n+1} - 2(k^2y)_n + (k^2y)_{n+1}}{h^2} + O(h^2)$$

با جاگذاری عبارت به دست آمده برای y_n'''' در (۲.۸) و قرار دادن حاصل در (۲.۷) به رابطه‌ی زیر می‌رسیم.

$$\left(1 + \frac{h^2}{12}k_{n+1}^2\right) y_{n+1} - 2\left(1 - \frac{5h^2}{12}k_n^2\right) y_n + \left(1 + \frac{h^2}{12}k_{n-1}^2\right) y_{n-1} = 0 + O(h^6) \approx 0 \tag{۲.۱۰}$$

به این ترتیب با حل معادله‌ی فوق بر حسب y_{n+1} یا y_{n-1} یک رابطه‌ی بازگشتی برای انتگرال گیری در جهت یا خلاف جهت x با خطایی از مرتبه‌ی $O(h^6)$ به دست می‌دهد.

برای انجام انتگرال بالا به دو شرط اولیه نیاز داریم. برای مثال می‌توان مقدار y و مشتق آن، y'، را در نقطه‌ی $x = 0$ معین کرد که در این صورت y_0 و y_1 معین هستند. با مشخص بودن y_0 و y_1 و با استفاده از رابطه‌ی بازگشتی (۲.۱۰) y_2 مشخص می‌شود. y_1 و y_2، y_3 را می‌دهند و به همین ترتیب تمام y_i ها به دست می‌آیند.

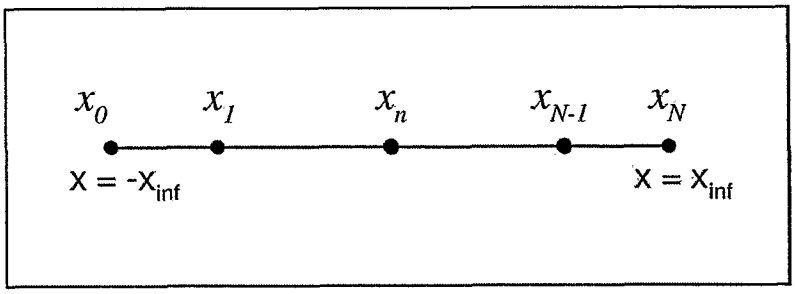
در بخش بعد که از الگوریتمِ نومرف در روش Shooting استفاده می‌کنیم به این مسئله بیشتر می‌پردازیم.

۲.۳ روش Shooting برای تعیین ویژه‌مقادیر معادله‌ی شرودینگر یک بعدی

ذره‌ای با جرم m را در نظر بگیرید که در پتانسیل یک بعدی $V(x)$ قرار دارد. فرض می‌کنیم پتانسیل به گونه‌ای باشد که در دو نقطه برای مثال $x = x_{min}$ و $x = x_{max}$ بی‌نهایت باشد و بین این دو به شکل یک چاه باشد (پتانسیل‌هایی مانند $V(x) = x^n$ که $n > 0$ از این گونه‌اند).

معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان و شرایط مرزی که حرکت این ذره را توصیف می‌کند به صورت زیر است

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \qquad \psi(x_{min}) = \psi(x_{max}) = 0 \tag{۲.۱۱}$$



شکل ۲.۳.۲نحوه‌ی گسسته کردن برای استفاده در الگوریتم انتگرال گیری نومرف

هدف تعیین ویژه‌مقادیرِ این معادله، E ها، است.

معادله‌ی شرودینگر فوق شکلی به صورت معادله‌ی (۲.۷) دارد و بنابراین می‌توانیم از الگوریتم نومرف برای انتگرال گرفتن از آن استفاده کنیم.

ابتدا باید فضا را گسسته کنیم. با توجه به اینکه ψ تنها بین x_{min} و x_{max} غیر صفر است، این بازه را به صورت زیر با شبکه‌یی با $N+1$ نقطه تقریب می‌زنیم(شکل (۲.۳) این وضعیت را با فرض $x_{min} = -x_{inf}$ و $x_{max} = x_{inf}$ نشان می‌دهد)

$$x \to x_n = x_{min} + nh$$

$$\psi \to \psi_n = \psi(x_n) \qquad (n = 0, \ldots, N)$$

همانطور که گفته شد h فاصله‌ی بین نقاط شبکه را نشان می‌دهد که برای شبکه‌ی متناهی‌نقطه تابعی است از بازه‌ای که شبکه روی آن تعریف می‌شود(x_{max} و x_{min}) و تعداد نقاط شبکه (در اینجا $N+1$) که مقدار آن از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید

$$h = \frac{x_{max} + x_{min}}{N}$$

در نتیجه‌ی گسسته کردن، شرایط مرزی در (۲.۱۱) به $\psi(x_N) = \psi(x_0) = 0$ تبدیل می‌شوند.

در این صورت در مشابهت با رابطه‌ی (۲.۸) می‌توان نوشت

$$\left(1 + \frac{h^2}{12}k_{n+1}^2\right)\psi_{n+1} - 2\left(1 - \frac{5h^2}{12}k_n^2\right)\psi_n + \left(1 + \frac{h^2}{12}k_{n-1}^2\right)\psi_{n-1} \approx 0 \qquad (۲.۱۲)$$

که در آن k^2 به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]$$

اگر آن را به فرم رابطه‌ی بازگشتی بر حسب ψ_{n+1} بنویسیم داریم

$$\psi_{n+1} \approx \left(1 + \frac{h^2}{12}k_{n+1}^2\right)^{-1}\left[\left(1 - \frac{5h^2}{12}k_n^2\right)\psi_n + \left(1 + \frac{h^2}{12}k_{n-1}^2\right)\psi_{n-1}\right] \qquad (۲.۱۳)$$

مشخص است که این رابطه دارای پارامتر E است و علاوه بر آن باید در شرایط مرزی

$$\psi(x_N) = \psi(x_0) = 0 \qquad (۲.۱۴)$$

نیز صدق کند.

در ادامه توضیح می‌دهیم که چگونه با استفاده از روش Shooting می‌توان با اعمال شرایط مرزی ـ (۲.۱۴) بر رابطه‌ی بازگشتی ـ(۲.۱۳) ویژه‌مقادیر را تعیین کرد.

روش Shooting برای تعیین ویژه‌مقادیر به صورت زیر است:

ابتدا یک مقدار برای E حدس می‌زنیم و انتگرال گیری ـ (۲.۱۳) را انجام دهیم. همانطور که گفته شد برای انجام این کار نیاز به دو شرط اولیه داریم. این شرایط را در x_0 که همان x_{min} است به صورت زیر انتخاب می‌کنیم

$$\begin{cases} \psi(x_0) = \psi_0 = 0 \\ \psi'(x_0) = \delta \quad \rightarrow \quad \psi_1 = h\delta \end{cases} \qquad (۲.۱۵)$$

که در آن δ یک عدد اختیاری است. (تساوی آخر در خط دوم با استفاده از تقریب ـ تفاضل سه نقطه‌ای ـ(۲.۵) نوشته شده است)

در رابطه‌ی بالا شرط اول خود یکی از شرایط ـ مرزی است که به این طریق آن را اعمال کرده‌ایم. از طرفی چون معادله یک معادله‌ی همگن است و جوابها بهنجار نیستند مقدار در نظر گرفته شده برای δ تاثیری در نتایج ندارد و بنابراین شرط اولیه‌ی ـ دوم نیز محدودیتی وارد نمی‌کند (تنها ضریب بهنجارش را تغییر می‌دهد که این تغییر در تعیین ویژه‌مقدار تاثیری ندارد).

با جاگذاری مقدار حدسی برای ویژه‌مقدار در رابطه‌ی بازگشتی ـ(۲.۱۳) و با استفاده از شرایط اولیه‌ی (۲.۱۵) انتگرال گیری می‌کنیم. اگر مقدار به دست آمده برای $\psi(x_N)$ شرط مرزی در این نقطه را ارضاء کند در این صورت مقدار حدس زده شده خود ـ ویژه‌مقدار است در غیر این صورت مقدار حدسی دیگری برای E در نظر گرفت و دوباره عملیات بالا را انجام داد. باید آنقدر عمل حدس زدن و انتگرال گیری را ادامه دهیم تا ویژه‌مقدار حدسی به صفر شدن $\psi(x_N)$ در مرز بی‌انجامد که در این حال، با توجه به اینکه هر دو شرط مرزی ارضاء شده‌اند، مقدار حدس زده شده خود ـ ویژه‌مقدار است. می‌توان این کار را ادامه داد تا کل $N+1$ ویژه‌مقدار را به دست آورد. (با توجه به اینکه شبکه‌ی در نظر گرفته شده $N+1$ نقطه دارد بنابراین حداکثر می‌توان $N+1$ ویژه‌مقدار را تعیین کرد.)

در عمل برای یافتن ویژه‌مقادیر، مقادیرE که شرایط مرزی را ارضاء می‌کنند روشهایی وجود دارد که در اینجا روش دو نیمی[۵] را که در مثال‌هایمان از آن استفاده کرده‌ایم توضیح می‌دهیم.

۲.۳.۱ روش دو نیمی برای تعیین ریشه‌های یک تابع

فرض کنید می‌خواهیم صفرهای تابعی مانند $\psi(x_n)$ را که تابع ـ متغیری مانند E است تعیین کنیم. ابتدا یک مقدار اولیه برای E انتخاب می‌کنیم، k. (با توجه به اینکه ویژه‌مقادیر مثبت هستند این مقدار اولیه را صفر در نظر می‌گیریم)

[۵] *Bisection*

با استفاده از آنچه که توضیح داده شد انتگرال گیری می‌کنیم تا ψ در مرز سمت راست $\psi(x_N)$ مشخص شود. به طور معمول مقدار به دست آمده برای $\psi(x_N)$ با شرط مرزی در این نقطه، $\psi(x_{inf}) = 0$، یکی نبوده و بنابراین مقدار در نظر گرفته شده ویژه‌مقدار نیست.

به مقدار اولیه به اندازه‌ی dk، که یک مقدار اختیاری است، اضافه می‌کنیم.

انتگرال را با مقدار جدید، $k + dk$، انجام می‌دهیم تا مقدار جدیدی برای $\psi(x_N)$ به دست آید.

علامت $\psi(x_N)$ جدید را، که با مقدار $k + dk$ به دست آمده است، با علامت $\psi(x_N)$ قبلی مقایسه می‌کنیم، دو حالت ممکن است اتفاق بیافتد یکی اینکه هم علامت باشند و دیگر اینکه علامتشان مختلف باشد. اگر هم علامت باشند به این نتیجه می‌رسیم که مقدار $\psi(x_N)$ صفر نشده است و بنابراین شرط مرزی نمی‌تواند بین k و $k + dk$ برآورده شود. در این حالت دوباره به آخرین مقدار، که حالا $k + dk$ است به اندازه‌ی dk اضافه می‌کنیم، مقدار حدس جدید $k + 2dk$ است عمل مقایسه‌ی علامت $\psi(x_N)$ را بین این مقدار و مقدار قبلی، $k + dk$، را انجام می‌دهیم، اگر باز هم علامت بودند دوباره به آخرین مقدار به اندازه‌ی dk اضافه می‌کنیم.
عمل اضافه کردن به حدس و مقایسه‌ی علامت $\psi(x_N)$ بین دو مقدار متوالی را آنقدر تکرار می‌کنیم تا جایی که علامت تابع موج عوض شود.

فرض می‌کنیم علامت $\psi(x_N)$ به ازای دو مقدار $k + idk$ و $k + (i + 1)dk$ عوض شده باشد. به این نتیجه می‌رسیم که تابع موج جایی صفر شده است و بنابراین ویژه‌مقدار در بازه‌ی $[k + (i + 1)dk, k + idk]$ قرار دارد. حالا کار ما این است که در این بازه که اندازه‌ی آن dk است به دنبال ویژه‌مقدار بگردیم.

بازه را به دو قسمت تقسیم می‌کنیم و بررسی می‌کنیم که در کدام نیمه‌ی بازه تابع موج تغییر علامت می‌دهد. برای این کار dk را نصف می‌کنیم، $dk = \frac{dk}{2}$ ، و آن را به $k + idk$ می‌افزاییم. علامت تابع موج را برای این مقدار، $k + (i + \frac{1}{2})dk$، که نقطه‌ی وسط بازه است تعیین می‌کنیم. با توجه به اینکه علامت تابع موج مربوط به مقدار وسط بازه با علامت کدام انتهای بازه فرق می‌کند دراین صورت ویژه‌مقدار در نیمه‌ی مربوط به آن انتها است. به این ترتیب بازه‌ی که باید در آن دنبال ویژه‌مقدار بگردیم نصف شده است. در ادامه دوباره dk را نصف می‌کنیم تا با استفاده از آن بازه‌ی جدید را دو نیم کنیم. دوباره مانند آنچه که گفته شد تعیین می‌کنیم که