به نام خداوند بخشنده مهربان

٤٢٤٥١

مرکز تحصیلات تکمیلی در علوم پایه زنجان

روش نیومرف بازبهنجارشده برای حل معادله شرودینگر

۲۰ /۷/ ۱۳۸۱

کتابخانه مرکز تحصیلات تکمیلی در علوم پایه زنجان

پایان‌نامهٔ کارشناسی‌ارشد

سید محمود هاشمی

استاد راهنما: دکتر محمود پیامی

۴۲۴۵۱

شهریور ۱۳۸۱

تقدیم به:

پدرم

و

به یاد مادرم

تشکر و قدردانی

در اینجا لازم است از استاد راهنمایم آقای دکتر محمود پیامی که در تمام مراحل، مشوق و راهنمایی دلسوز بودند، تشکر و قدردانی مضاعف داشته باشم. همچنین از مسئولینِ مرکز، جناب آقای دکتر ثبوتی و دکتر خواجه‌پور که محیط مناسبی برای تحقیق فراهم نموده‌اند و ازاساتید و دوستان عزیزم آقایان دکتر خرمی، دکتر فتح‌اللهی، دکتر کلاهچی، مجید نیلی، حسین صفری، عباس عابدینی، یونس ایمانی، سید جعفر مصطفوی، فرشید محمد رفیعی، عبدالله ملکزاده، فتح‌الله دویرانی، احسان ندایی، احمد حسینی‌زاه، قاسم اکسیری‌فرد، حسین فضلی، مهیار مددی، سید مهدی واعظ‌علائی، کمال مام‌رش، علیرضا مرادی، مهدی مرادخانی، امید فرزادیان، علی مرادیان، محمد شاهی‌پسند، حمید امامی‌پور و رضا صفاری به خاطر کمک‌هایی که در تمامی مراحل تحصیل و در مراحل تایپ و تصحیح این پایان نامه داشته‌اند، کمال تشکر و قدردانی را دارم و برایشان آرزوی موفقیت می‌کنم. در انتها از تمامی کارکنان مرکز تحصیلات تکمیلی در علوم پایه زنجان از جمله کتابخانه، آموزش و سایت کامپیوتر به ویژه خانم‌ها موسوی، اسماعیلی، غفرانی، محتوی، خالقی، رحیمی، سلطانی، افشار، منصوری و آقایان دکتر قدس، زنجانی، سیدین، ریاحی و شهیدی به خاطر همکاریهای صمیمانه‌شان کمال تشکر را دارم و برایشان آرزوی سلامتی می‌کنم.

چکیده

روش‌های مختلفی برای حلّ عددی معادله‌ی شرودینگر یک بعدی و معادلات شرودینگر جفت شده وجود دارد. از این میان روش نیومرف بازبهنجار شده، روشی قوی برای حل عددی این معادلات می‌باشد. در فصل‌های مختلف این پایان‌نامه جزئیات این روش برای معادله‌ی یک بعدی شرودینگر و معادلات جفت‌شده‌ی شرودینگر توضیح داده شده است. با استفاده از کد کامپیوتری که بر این اساس نوشته‌ایم توانستیم این معادلات را بطور عددی برای مسائل گوناگون حل کرده و نتایج نسبتاً دقیقی بدست آوریم. به ویژه، ما توانستیم با حل عددی معادلات جفت شده برای مولکول هیدروژن یونیده انرژی پیوندی و طول پیوند مولکول را محاسبه نمائیم که در مقایسه با نتایج به دست آمده از روش های وردشی، توافق عالی با تجربه دارد.

فهرست مندرجات

۱ حل مسأله ویژه مقداری یک بعدی ۱۰

۱.۱ روش گوردُن در حلّ معادله‌ی شرودینگر شعاعی ۱۰

۲.۱ محاسبات ویژه مقداری با استفاده از نظریه‌ی نوسانی ۱۵

۳.۱ روش مشتق لگاریتمی ۱۷

۴.۱ روش نیومرف باز بهنجار شده ۲۰

۵.۱ ویژه توابع ۲۶

۲ کاربرد روش نیومرف بازبهنجارشده ۲۹

۱.۲ مثال‌ها و بحث ۲۹

۲.۲ اتم هیدروژن ۴۳

۳ حل حالات قیدی معادلات شرودینگر جفت شده ۴۸

۱.۳ محاسبات ویژه مقداری ۴۸

۲.۳ روش نیومرف بازبهنجارشده ۵۴

۳.۳ محاسبات ویژه‌توابع ۵۹

۴.۳ شمارش گره‌ها ۶۰

۵.۳ مکان یابی نقطه‌ی انطباق ۶۱

۴ کاربرد روش نیومرف باز بهنجار شده برای کانال‌های جفت شده ۶۳

۱.۴ محاسبات نمونه و بحث ۶۳

۲.۴ حل حالات قیدی مولکول هیدروژن یونیزه شده ۸۰

۳.۴ اجتناب از برخورد در مولکول هیدروژن یونیزه شده ۹۱

۴.۴ انرژی و طول پیوند مولکول هیدروژن یونیزه شده ۹۶

لیست اشکال

۱.۲ پتانسیل مورس ۳۰

۲.۲ پتانسیل دوکمینه‌ای نامتقارن ۳۰

۳.۲ پتانسیل متقارن ۳۲

۴.۲ توابع موج پتانسیل مورس برای حالت پایه و حالت برانگیخته با استفاده از ۲۰۴۹ نقطه، در بازه‌ی $۱/٦A$. ۳٦

۵.۲ توابع موج پتانسیل مورس برای حالت های دوّم و سوّم برانگیخته با استفاده از ۲۰۴۹ نقطه، در بازه‌ی $۱/٦A$. ۳۷

٦.۲ توابع موج پتانسیل دو کمینه‌ای نامتقارن برای حالت پایه و حالت برانگیخته با استفاده از ۲۰۴۹ نقطه، در بازه‌ی $۱/٦A$. ۳۸

۷.۲ توابع موج پتانسیل دو کمینه‌ای نامتقارن برای حالت های دوّم و سوّم برانگیخته با استفاده از ۲۰۴۹ نقطه، در بازه‌ی $۱/٦A$. ۳۹

۸.۲ ویژه مقدار حالت پایه‌ی پتانسیل مورس (شکل بالا) و پتانسیل دو کمینه‌ای نامتقارن (شکل پایین) برای مقادیر مختلف فاصله‌ی نقاط شبکه در بازه‌ی $1/6A$. ۴۰

۹.۲ توابع موج پتانسیل دو کمینه‌ای متقارن برای حالت پایه و حالت برانگیخته با استفاده از ۴۰۰۱ نقطه، در بازه‌ی $4A$. ۴۱

۱۰.۲ توابع موج پتانسیل دو کمینه‌ای متقارن برای حالت های دوّم و سوّم برانگیخته با استفاده از ۴۰۰۱ نقطه، در بازه‌ی $4A$. ۴۲

۱۱.۲ توابع موج اتم هیدوژن برای حالت پایه‌ی $l = 0$، $(1s)$، و حالت پایه‌ی $l = 1$، $(2p)$، با استفاده از ۶۰۰۰۱ نقطه، در بازه‌ی $60a_0$. ۴۶

۱۲.۲ توابع موج اتم هیدوژن برای حالت برانگیخته‌ی $l = 0$، $(2s)$، و حالت برانگیخته‌ی $l = 1$، $(3p)$، با استفاده از ۶۰۰۰۱ نقطه، در بازه‌ی $60a_0$. ۴۷

۱.۳ جستجوی نقطه‌ی انطباق ۶۲

۱.۴ دو عضو اوّل پتانسیل قطری شده‌ی نوسانگر هارمونیک غیر همسانگرد. ۶۸

۲.۴ عناصر اوّل و دوّم بردار تابع موج حالت پایه‌ی نوسانگر هارمونیک غیر همسانگرد با استفاده از ۸ کانال جفت شده و فاصله‌ی نقاط شبکه $0/03$. ۶۹

۳.۴ عناصر سوّم و چهارم بردار تابع موج حالت پایه‌ی نوسانگر هارمونیک غیر همسانگرد با استفاده از ۸ کانال جفت شده و فاصله‌ی نقاط شبکه ۰/۰۳. . . . . ۷۰

۴.۴ عناصر اوّل، دوّم، سوّم و چهارم بردار تابع موج حالت پایه‌ی نوسانگر هارمونیک غیر همسانگرد با استفاده از ۸ کانال جفت شده و فاصله‌ی نقاط شبکه ۰/۰۳. . . . . ۷۱

۵.۴ ویژه مقادیر $E_{۳,۲}$ و $E_{۴,۰}$ که با استفاده از ۵ کانال جفت شده، برای مقادیر مختلف ω، محاسبه شده و همراه با مقادیر دقیق رسم شده‌اند. ۷۲

۶.۴ همگرایی ویژه مقدار حالت پایه برای سه (دلتا) و چهار کانال (مربع) جفت شده بازای مقادیر مختلف فاصله‌ی نقاط شبکه. ۷۴

۷.۴ توابع موج پتانسیل مورس و پتانسیل دو کمینه‌ای نامتقارن بصورت جفت شده برای حالت پایه و حالت برانگیخته با استفاده از ۳۰۱ نقطه، در بازه‌ی ۱/۶Å. ۷۸

۸.۴ توابع موج پتانسیل مورس و پتانسیل دو کمینه‌ای نامتقارن بصورت جفت شده برای حالت‌های دوّم و سوّم برانگیخته با استفاده از ۳۰۱ نقطه، در بازه‌ی ۱/۶Å. ۷۹

۹.۴ ویژه مقدار حالت پایه اتم هلیوم یونیزه شده برای مقادیر مختلف فاصله‌ی نقاط شبکه بازای مقدار بسیار کوچک فاصله‌ی جدایی دو هسته (بوهر$^{-۸}$۱۰) با استفاده از ۸ کانال جفت شده. ۸۴

۱۰.۴ ویژه مقدار حالت پایه مولکول هیدروژن یونیزه شده برای مقادیر مختلف فاصله‌ی نقاط شبکه بازای ۵ (دلتا)، ۶ (گرادیان)، ۸ (الماس) و ۱۲ (مربع) کانال جفت شده. . . . ۸۵

۱۱.۴ دو عضو اوّل پتانسیل قطری شده‌ی مولکول هیدروژن یونیزه شده. ۸۶

۱۲.۴ عناصر اوّل و دوّم بردار تابع موج حالت پایه‌ی مولکول هیدروژن یونیزه شده با استفاده از ۸ کانال جفت شده و فاصله‌ی نقاط شبکه ۰/۰۱۵. . . . . ۸۷

۱۳.۴ عناصر سوّم و چهارم بردار تابع موج حالت پایه‌ی مولکول هیدروژن یونیزه شده با استفاده از ۸ کانال جفت شده و فاصله‌ی نقاط شبکه ۰/۰۱۵. . . . . ۸۸

۱۴.۴ عناصراوّل، دوّم، سوّم و چهارم بردار تابع موج حالت پایه‌ی مولکول هیدروژن یونیزه شده با استفاده از ۸ کانال جفت شده و فاصله‌ی نقاط شبکه ۰/۰۱۵. . . . . ۸۹

۱۵.۴ مجذور تابع موج حالت پایه‌ی مولکول هیدروژن یونیزه شده در صفحه‌ای که هسته‌ها در آن قرار دارند با استفاده از ۸ کانال جفت شده و فاصله‌ی نقاط شبکه ۰/۰۱۵. . ۹۰

۱۶.۴ قاعده‌ی عدم برخورد. ۹۱

۱۷.۴ ۵ ویژه مقدار اولیّه‌ی مولکول هیدروژن یونیزه شده برای مقادیر مختلف فاصله‌ی جدائی هسته‌ها با استفاده از ۸ کانال جفت شده و فاصله‌ی نقاط شبکه ۰/۰۱۵. . . . . ۹۵

۱۸.۴ انرژی حالت پایه‌ی مولکول هیدروژن یونیزه شده برای مقادیر مختلف فاصله‌ی جدائی هسته‌ها با استفاده از ۴، ۸، ۱۲، ۱۶ و ۲۰ کانال جفت شده و فاصله‌ی نقاط شبکه ۰/۰۱۵. . . . . ۱۰۲

مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران

۱۹.۴ انرژی حالت پایه‌ی مولکول هیدروژن یونیزه شده برای مقادیر مختلف فاصله‌ی جدائی هسته‌ها با استفاده از ۱۶ و ۲۰ کانال جفت شده و فاصله‌ی نقاط شبکه ۰/۰۱۵ (خط مجانبی مربوط به ویژه مقدار حالت پایه‌ی اتم هیدروژن می‌باشد). ۱۰۳

لیست جداول

۱.۲ پارامترهای پتانسیل مورس و پتانسیل دو کمینه‌ای نامتقارن ۳۱

۲.۲ تفاوت ویژه مقادیر تحلیلی و عددی پتانسیل مورس مربوط به برنامه‌ی ما و مرجع [۲] که با استفاده ۲۰۴۹ نقطه در بازه‌ی $۱/٦A$ بدست آمده‌اند. (واحد بکار رفته در متن توضیح داده شده است) ۳۳

۳.۲ ویژه مقادیر عددی پتانسیل دو کمینه‌ای نامتقارن با استفاده از ۲۰۴۹ نقطه در بازه‌ی $۱/٦A$ که با مقادیر مرجع [۲] مقایسه شده است. (واحد بکار رفته در متن توضیح داده شده است) ۳۴

۴.۲ ویژه مقادیر عددی پتانسیل دو کمینه‌ای متقارن با استفاده از ۴۰۰۱ نقطه در بازه‌ی $۴A$ که با مقادیر مرجع [۲] مقایسه شده است. (واحد بکار رفته در متن توضیح داده شده است) ۳۵

۱.۴ ویژه مقادیر تحلیلی و عددی نوسانگر هارمونیک سه بعدی ناهمسانگرد برای $\omega = ۱/۵$ با استفاده از ۸ کانال جفت شده و فاصله‌ی نقاط شبکه ۰/۰۳. نتایج ما به همراه نتایج مرجع [۴] برای مقایسه آمده است. ۶۷

۲.۴ ویژه مقادیر عددی پتانسیل مورس و پتانسیل دو کمینه‌ای نامتقارن که بصورت جفت شده و با استفاده از فقط ۳۰۱ نقطه در بازه‌ی ۱/۶۸ بدست آمده است. (واحد بکار رفته در متن توضیح داده شده است) ۷۷

۳.۴ ویژه مقادیر عددی حالت پایه و حالت برانگیخته برای تعداد کانال‌های مختلف بازای فاصله‌ی هسته‌ها، بوهر۲ و فاصله‌ی نقاط شبکه ۰/۰۱۵. نتایج ما به همراه نتایج مرجع [۴] برای مقایسه آمده است. نتایج مرجع [۴] با برونیابی برای مقادیر $h = ۰/۰۴$ و $h = ۰/۰۲$ محاسبه شده است. ۸۲

۴.۴ انرژی پیوندی برحسب ev و طول پیوند برحسب A که با استفاده از روش های مختلف بدست آمده است. ۱۰۲

فصل ۱

حل مسأله ویژه مقداری یک بعدی

۱.۱ روش گوردُن در حلّ معادله‌ی شرودینگر شعاعی

در این بخش سعی ما این است که به عنوان مقدمه‌ای از روش‌های مختلف در حلّ معادله‌ی شرودینگر یک بعدی، روش گوردُن [۱] در حلّ معادله‌ی شرودینگر شعاعی را به طور مختصر بیان کنیم. این روش یک روش نیمه محاسباتی و نیمه تحلیلی است که همین مسأ له، بکارگیری آن را مشکل‌تر می‌کند. بتدریج در بخش‌های بعد روش بهتری را در حلّ معادله‌ی شرودینگر یک بعدی فراهم خواهیم کرد.

معادله‌ی شرودینگر شعاعی یک بعدی به شکل

$$\left[d^۲\psi(R)/dR^۲\right] + [\epsilon - U(R)]\psi(R) = ۰, \tag{۱.۱}$$

نوشته می‌شود که در آن انرژی کاهش یافته ϵ و انرژی پتانسیل کاهش یافته $U(R)$، از روابط

$$\epsilon = ۲\mu E/\hbar^۲, \tag{۲.۱}$$

$$U(R) = ۲\mu V(R)/\hbar^۲, \tag{۳.۱}$$