

رهیافت حدس جهت محاسبه انرژی حالت پایه معادلات شرودینگر غیر خطی در فیزیک بس‌ذره‌ای

سید محمد علی آل‌عمرانی نژاد¹، مهدی سلیمانی^{2*}

¹ گروه ریاضی، دانشکده علوم، دانشگاه صنعتی قم، قم، ایران

² گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه صنعتی قم، قم، ایران

تاریخ دریافت: 1396/04/14 ویرایش نهایی: 1396/06/20 تاریخ پذیرش: 1396/10/09

چکیده

در این مقاله، معادله شرودینگر غیرخطی ظاهر شده در برخی از سیستم‌های بس‌ذره‌ای مانند نانوسیم باردار با لایه مولکولی قطبیده نرم، چاه کوآتومی در حضور برهم‌کنش الکترون-الکترون، معادله گراس-پیتا افسکی برای چگالیده بوز-اینشتین در حضور برهم‌کنش‌های دو جسمی و سه جسمی را بررسی کرده‌ایم. محاسبه انرژی حالت پایه این معادله‌ها از اهمیت فراوانی برخوردار است و به دست آوردن آن با روش‌های تحلیلی، بسیار پیچیده است. همچنین در صورت حل با روش‌های عددی نظیر روش خودسازگار، به برنامه نویسی دشواری نیاز دارد. در این مقاله، انرژی حالت پایه به کمک روش حساب تغییرات اولر-لاگرانژ و استفاده از حدس‌های ساده و مناسب محاسبه شده است. مقایسه نتایج حاصل از ترکیب روش حساب تغییرات و حدس با روش‌های موجود در مقالات اخیر، نشان دهنده دقت بالای این روش می‌باشد.

کلیدواژه‌گان: روش حساب تغییرات اولر-لاگرانژ، معادله شرودینگر غیر خطی یک بعدی، نانوسیم باردار با لایه قطبیده مولکولی نرم، چاه کوآتومی در حضور برهم‌کنش الکترون-الکترون، چگالیده بوز اینشتین

مقدمه

داغ [3] به معادله شرودینگر غیر خطی برخورد می‌کنیم که روش‌های زیادی برای حل این معادله وجود ندارد. روش‌های موجود هم دارای پیچیدگی‌های محاسباتی زیادی هستند که کار مطالعه این سیستم‌ها را با دشواری‌هایی روبرو می‌کنند. تعدادی از روش‌های موجود برای حل معادله شرودینگر غیر خطی عبارتند از روش ماتریس انتقال [4]، روش تقسیم زمانی [5]، روش حل خودسازگار [6]، روش پراکندگی معکوس [7]، روش تفاضل محدود فشرده [8]، روش آسایش [9].

بررسی سیستم‌های فیزیکی می‌تواند به صورت تک‌ذره‌ای و یا بس‌ذره‌ای انجام شود. پاسخ کوآتومی این گونه سیستم‌ها، معمولاً با حل یک معادله شرودینگر شروع می‌شود و سپس بقیه کمیات فیزیکی به کمک این پاسخ‌ها به دست می‌آیند. در حالتی که به معادله شرودینگر خطی برخورد می‌کنیم، شیوه‌های زیاد و مختلفی برای حل وجود دارد. در هر صورت، در بررسی سیستم‌های فیزیکی بسیاری نظیر بررسی چگالش بوز-اینشتین [1]، انتشار سالیوتونها [2]، امواج گرانشی دامنه کوچک [3]، امواج لانگمویر در پلاسما

*نویسنده مسئول: Solaimani@qut.ac.ir

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

روی بازه $[-L, L]$ می‌شود که در آن پارامتر برهم‌کنش خطی، $V(x)$ پتانسیل محصورسازی، G و D پارامترهای غیرخطی سیستم هستند. در این معادلات، باید دو مجهول E (انرژی) و $\psi(x)$ را به‌گونه‌ای بیابیم که اولاً $\psi(L) = \psi(-L) = 0$ و ثانیاً $\int_{-L}^L \psi^2(x) dx = 1$. در ادامه به بررسی حالات خاص معادله 1 می‌پردازیم.

الف: چاه مربعی در حالت خطی

اگر در معادله 1، مقدارهای $V(x)$ و G و D برابر با صفر باشند، به معادله یک چاه کوآتومی بینهایت [13] برخورد می‌کنیم. برای ساخت این چاه کوآتومی تنها کافی است چند ماده که دارای گاف‌های انرژی مختلفی هستند را در کنار هم روی یک صفحه مانند شیشه، رشد دهیم. به‌عنوان مثال، چاهی که با $\text{ZrO}_2/\text{SiO}_x\text{Ny}/\text{n-Si}$ ساخته شود را تقریباً می‌توان چاه پتانسیل بینهایت در نظر گرفت [14].

ب: نانوسیم باردار با لایه مولکولی قطبیده نرم
در این حالت مقدارهای $V(x)$ و D برابر با صفر هستند، G برهم‌کنش غیر خطی و U برهم‌کنش خطی حامل‌ها با زیر سیستم مولکولی کشسان است [15].

ج: چاه کوآتومی در حضور برهم‌کنش الکترون-الکترون

در این حالت مقدارهای U و D برابر با صفر هستند، G (برهم‌کنش الکترون-الکترون) منفی است [16].

د: معادله گراس-پیتا افسکی برای چگالیده بوز-اینشتین در حضور برهم‌کنش‌های دو جسمی و سه جسمی

در این حالت $U = 0$ ، G (برهم‌کنش دو جسمی) منفی و D (برهم‌کنش سه جسمی) مثبت است [17, 18].

حل تحلیلی معادلات در فیزیک به دلایل مختلف، مانند جفت‌شدگی درجات آزادی حامل‌های بار در راستاهای متفاوت می‌تواند بسیار دشوار شود. به‌همین دلیل در بسیاری از موارد برای حل معادلات حاکم از روش قدرتمند حساب تغییرات استفاده می‌شود [11-10]. استفاده از این روش، حتی با کمک یک تابع آزمون ساده، به یافتن انرژی حالت پایه با دقت بسیار خوبی منجر می‌شود ولی تنها انرژی حالت پایه را به دست می‌دهد و برای یافتن بقیه ویژه‌حالات به ایجاد توابع آزمون دیگری نیاز است که بر تابع آزمون اولیه عمود باشند. خوشبختانه در بسیاری از موارد ما تنها به انرژی حالت پایه و یا حداکثر چند تراز پایین انرژی نیازمندیم.

نویسندگان در [12] انرژی حالت پایه یک نانوسیم ابرشبکه‌ای با لایه‌ای از مولکول‌های قطبیده حول محور آن را به کمک روش حساب تغییرات اویلر-لاگرانژ بررسی کرده‌اند. در این مقاله با تعمیم این کار، معادلات شرودینگر غیر خطی ظاهر شده در یک نانوسیم باردار با لایه مولکولی قطبیده نرم، یک چاه کوآتومی چندگانه در حضور برهم‌کنش الکترون-الکترون و چگالیده بوز-اینشتین در حضور برهم‌کنش‌های دو جسمی و سه جسمی (معادله گراس-پیتا افسکی) را به کمک حدس در روش حساب تغییرات اویلر-لاگرانژ حل کرده و انرژی‌های حالت پایه را می‌یابیم. برای اثبات درستی یافته‌ها، در حالت‌های خاص، پاسخ‌ها را با روش‌های دیگر مقایسه کرده‌ایم.

معادلات شرودینگر در فیزیک بس‌ذره‌ای

تعداد زیادی مسئله در فیزیک تک و بس‌ذره‌ای وجود دارد که منجر به معادله شرودینگر غیر خطی به شکل

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (U + V(x) - G|\psi(x)|^2)\psi(x) + D|\psi(x)|^4\psi(x) = E\psi(x) \quad 1$$

صدق می‌کند که این همان معادله 1 می‌باشد. همچنین با استفاده از رابطه 6 و انتگرال‌گیری جزء به جزء و به کار بستن معادله 1 داریم

8

$$\begin{aligned} I(\psi) &= \int_{-L}^L \frac{1}{2}(\psi'(x))^2 + (U + V(x))\psi^2(x) \\ &\quad - \frac{G}{2}\psi^4(x) + \frac{D}{3}\psi^6(x) - E\psi^2(x) dx \\ &= \int_{-L}^L -\frac{1}{2}\psi(x)\psi''(x) + (U + V(x))\psi^2(x) \\ &\quad - \frac{G}{2}\psi^4(x) + \frac{D}{3}\psi^6(x) - E\psi^2(x) dx = \int_{-L}^L E\psi^2(x) \\ &\quad - (U + V(x) - G|\psi(x)|^2 + D|\psi(x)|^4)\psi^2(x) \\ &\quad + (U + V(x))\psi^2(x) - \frac{G}{2}\psi^4(x) + \frac{D}{3}\psi^6(x) \\ &\quad - E\psi^2(x) dx = \int_{-L}^L \frac{G}{2}\psi^4(x) - \frac{2D}{3}\psi^6(x) dx. \end{aligned}$$

لذا با توجه به اینکه $\int_{-L}^L \psi^2(x) dx = 1$ ، انرژی کمینه را می‌توان از روابط زیر به دست آورد

9

$$\begin{aligned} E &= U - I(\psi) + \int_{-L}^L \frac{1}{2}(\psi'(x))^2 \\ &\quad - \frac{G}{2}\psi^4(x) + \frac{D}{3}\psi^6(x) + V(x)\psi^2(x) dx \\ &= U - \int_{-L}^L \frac{G}{2}\psi^4(x) - \frac{2D}{3}\psi^6(x) dx \\ &\quad + \int_{-L}^L \frac{1}{2}(\psi'(x))^2 - \frac{G}{2}\psi^4(x) \\ &\quad + \frac{D}{3}\psi^6(x) + V(x)\psi^2(x) dx \\ &= U + \int_{-L}^L \frac{1}{2}(\psi'(x))^2 - G\psi^4(x) \\ &\quad + D\psi^6(x) + V(x)\psi^2(x) dx \end{aligned}$$

برای راحتی کار قرار دهید $W = 2(E - U)L^2$ لذا

$$\begin{aligned} W &= L^2 \int_{-L}^L (\psi'(x))^2 - 2G\psi^4(x) \\ &\quad + 2D\psi^6(x) + 2V(x)\psi^2(x) dx \end{aligned} \quad 10$$

در ادامه با استفاده از حدس‌های مختلف، کمینه تقریبی W را محاسبه خواهیم کرد. با توجه به اینکه

در ادامه به حل معادلات ارائه شده، به کمک روش حساب تغییرات اویلر-لاگرانژ و حدس می‌پردازیم.

روش حساب تغییرات اویلر-لاگرانژ

ابتدا قضیه اویلر لاگرانژ که نقش اساسی در حساب تغییرات ایفا می‌کند را بیان می‌کنیم. مجموعه

$$S = \{y : y \in C^1[a, b], y(a) = y_a, y(b) = y_b\} \quad 2$$

و تابع $F(\alpha, \beta, \gamma) : C^1 \times C^1 \times \mathbb{R} \rightarrow C$ که نسبت به (α, β, γ) دارای مشتقات پیوسته مرتبه دوم می‌باشد را در نظر بگیرید. همچنین فرض کنید تابع $I : S \rightarrow \mathbb{R}$ به صورت

$$I(y) = \int_a^b F(y(t), y'(t), t) dt \quad 3$$

تعریف شده باشد. در این صورت اگر $y_0 \in S$ نقطه اکسترمم تابع I باشد، آنگاه به ازای هر $t \in [a, b]$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \alpha}(y_0(t), y_0'(t), t) - \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial F}{\partial \beta}(y_0(t), y_0'(t), t) \right) = 0 \end{aligned} \quad 4$$

رابطه 4 به معادله اویلر-لاگرانژ معروف است و کاربردهای فراوانی در حساب تغییرات دارد. برای حل معادله 1 به ازای $m^* = \hbar = 1$ به روش اویلر-لاگرانژ، قرار دهید

$$S = \left\{ \psi \in C^1 : \int_{-L}^L \psi^2(x) dx = 1, \psi(\pm L) = 0 \right\} \quad 5$$

همچنین عملگر $I : S \rightarrow \mathbb{R}$ را به صورت زیر در نظر بگیرید

$$I(\psi) = \int_{-L}^L \frac{1}{2}(\psi'(x))^2 + (U + V(x))\psi^2(x) \quad 6$$

$$- \frac{G}{2}\psi^4(x) + \frac{D}{3}\psi^6(x) - E\psi^2(x) dx$$

در این صورت اگر ψ نقطه اکسترمم عملگر I باشد، آنگاه در معادله دیفرانسیل

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}\psi''(x) + (U + V(x))\psi(x) \\ - G\psi^3(x) + D\psi^5(x) = E\psi(x) \end{aligned} \quad 7$$

$$\psi(x, a) = 1 + ax^2 - \left(\frac{a}{L^2} + \frac{1}{L^4}\right)x^4 \quad 13$$

در این حدس، پس از تعیین مقدار L و G ، مقدار a را با کمینه کردن عبارت $W(a)$ به دست می آوریم. نتایج حاصل نشان می دهد که مقدار انرژی با این حدس، با مقادیر به دست آمده از روش های مرجع های [15] و [19] بسیار نزدیک است.

حدس سوم: تابع

$$\psi_3(x, a, b) = \frac{\psi(x, a, b)}{\sqrt{\int_{-L}^L \psi^2(t, a, b) dt}} \quad 14$$

که

$$\psi(x, a, b) = 1 + ax^2 - \left(\frac{a}{L^2} + \frac{1}{L^4}\right)x^4 + b \cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right) \quad 15$$

در این حدس، پس از تعیین مقدار L و G ، مقدار a و b را با کمینه کردن عبارت $W(a, b)$ به دست می آوریم. مقدار انرژی حاصل از انتخاب این حدس، از مقدار انرژی حاصل از حدس اول و دوم، کمتر می باشد که این امر، نشان دهنده دقت بالاتر این حدس نسبت به حدس اول و دوم می باشد.

حدس چهارم:

تابع

$$\psi_4(x, a, b) = \frac{\psi(x, a, b)}{\sqrt{\int_{-L}^L \psi^2(t, a, b) dt}} \quad 16$$

که

$$\psi(x, a, b) = (1 + ax^2 + bx^4) \cos\left(\frac{\pi}{2L}x\right) \quad 17$$

تابع موج مربوط به معادله شرودینگر مطرح شده در بازه بسته $[-L, L]$ پیوسته می باشد و هر تابع پیوسته روی بازه بسته را می توان توسط یک چند جمله ای روی همان بازه بسته تقریب زد (قضیه وایراشتراس)، حدس $\psi(x)$ را از چند جمله ای ها و یا ضرب عبارتی در یک چند جمله ای انتخاب کرده ایم که دارای ویژگی های زیر باشد:

- $\psi(L) = \psi(-L) = 0$
- $\int_{-L}^L \psi^2(x) dx = 1$
- تابع $\psi(x)$ زوج باشد.

زوج بودن تابع موج مربوط به انرژی حالت پایه به این دلیل است که در غیاب جمله غیر خطی جواب معادله با پتانسیل زوج، باید زوج باشد. در ضمن جمله غیر خطی که نقش یک پتانسیل را بازی می کند خود زوج است. همچنین این جمله غیر خطی، همان چگالی الکترون ها است که فقط چاه پتانسیل را عمیق تر می کند و روی زوج و فرد بودن جواب ها تأثیری ندارد. در ادامه، چند نمونه از حدس ها را بیان می کنیم.

حدس اول: تابع

$$\psi_1(x) = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{L}} \left(1 - \frac{x^2}{L^2}\right) \quad 11$$

این حدس، بسیار ساده است و می توان مقدار انرژی را با تقریب نسبتاً خوبی برای مقادیر کوچک G ، به دست آورد.

حدس دوم: تابع

$$\psi_2(x, a) = \frac{\psi(x, a)}{\sqrt{\int_{-L}^L \psi^2(t, a) dt}} \quad 12$$

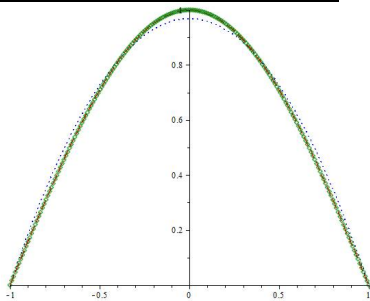
که

$$\psi_{Exact}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cos \frac{\pi}{2L} x \quad 19$$

با استفاده از رابطه 10 و قرار دادن حدس اول در آن، مقدار انرژی با $W = 2.5$ برابر خواهد شد. مقدارهای به‌دست آمده از حدس اول و دوم در جدول شماره 1 با جواب دقیق مقایسه شده است و نشان‌دهنده دقت بسیار خوب حدس دوم است. نمودار تابع موج حالت پایه به‌دست آمده از حدس‌های 1 و 2 به‌همراه پاسخ دقیق در شکل 1 آمده است. در اینجا نیز شاهد دقت بالای حدس‌های اول و دوم شاهد هستیم هرچند تابع حدسی اول از دقت کمتری برخوردار است و این هم بدان دلیل است که در آن پارامتر آزادی برای کمینه سازی نسبت به آن وجود ندارد.

جدول 1. مقایسه نتایج به‌دست آمده از حل معادله 18.

تابع موج	مقدار انرژی حالت پایه W
جواب دقیق	2,467401101
حدس اول	2,5
حدس دوم	2,467437405



شکل 1. نمودار مقایسه تابع دقیق (خط پر) موج حالت پایه معادله 18 با حدس‌های اول (نقطه چین) و دوم (خط چین).

بررسی نانوسیم باردار با لایه مولکولی قطبیده نرم
حال به حل معادله 20 می‌پردازیم.

20

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + (U - G|\psi(x)|^2) \psi(x) = E\psi(x)$$

در این حدس، پس از تعیین مقدار L و G ، مقدارهای a و b را با کمینه کردن عبارت $W(a, b)$ به‌دست می‌آوریم. در این حدس نیز مقدار انرژی حاصل، از مقدار انرژی حاصل از حدس اول و دوم، کمتر می‌باشد که این امر، نشان‌دهنده دقت بالاتر این حدس نسبت به حدس اول و دوم می‌باشد.

در ادامه، انرژی حالت پایه معادله شرودینگر 1 را با استفاده از این حدس‌ها و قرار دادن آنها در رابطه 10، محاسبه خواهیم کرد. همچنین، انرژی حالت پایه حاصل از این روش را با روش‌های استفاده شده از مرجع‌های [15] و [19] مقایسه می‌کنیم. نکته قابل توجه در استفاده از حدس‌ها این است که به‌ازای برخی از مقادیر G ، ممکن است مسئله کمینه سازی با حدس سوم، جواب نداشته باشد اما با حدس چهارم جواب داشته باشد و برعکس و یا اینکه فقط از حدس دوم مقدار تقریبی را بیابیم. این بدین معنی است که بر عکس آنچه در حالت معادله شرودینگر خطی وجود دارد که به‌ازای هر حدسی یک جواب تقریباً خوب وجود دارد در حالت معادله شرودینگر غیر خطی این امر صحیح نیست. نکته دیگری که در اینجا در مورد معادله شرودینگر غیرخطی شاهد هستیم آن است که با افزایش تعداد پارامترهای آزاد در تابع حدس و کمینه کردن نسبت به پارامترهای بیشتر لزوماً به جواب‌های بهتری نمی‌رسیم.

بررسی چاه مربعی در حالت خطی

معادله مرتبط با چاه مربعی به‌صورت

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + U\psi(x) = E\psi(x) \quad 18$$

می‌باشد. با محاسبه‌ای کوتاه از روش حل معادلات دیفرانسیل مرتبه دوم، می‌توان تابع موج حالت پایه و انرژی وابسته به آنرا به‌صورت دقیق محاسبه کرد.

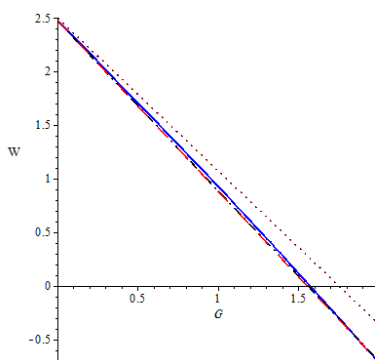
انرژی حالت پایه برابر است با $W = \frac{\pi^2}{4}$. همچنین تابع موج مربوط به انرژی حالت پایه برابر است با

نمودار تابع موج حالت پایه برحسب مکان و نمودار انرژی حالت پایه برحسب تغییرات G ، به ترتیب در شکل‌های 2 و 3 آمده است. همان‌گونه که در شکل 2 مشاهده می‌کنیم، تابع‌های موج حالت پایه با تقریب نسبتاً خوبی به هم نزدیک می‌باشند. همچنین با توجه به شکل 3، با افزایش ضریب غیر خطی G ، مقدار انرژی حالت پایه کاهش پیدا می‌کند. در اینجا نیز مشاهده می‌کنیم که کمترین دقت مربوط به حدس اول است که بدون پارامتر آزاد است. این امر اهمیت استفاده از توابع حدس با پارامترهای آزاد را نشان می‌دهد.

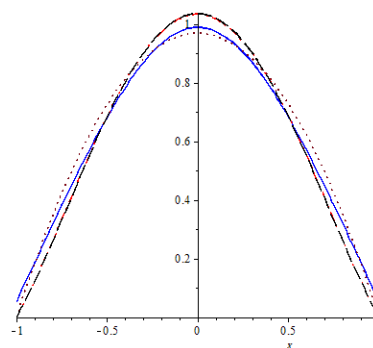
معادله 20 در [15] با ارائه راه حلی نسبتاً پیچیده، به کمک توابع بیضوی حل شده است. با استفاده از حدس اول مقدار انرژی برابر است با $W \approx 2.5 - 1.4285714LG$ مقدار W را برحسب LG به دست آورده‌ایم تا بتوان اثر پارامتر غیر خطی G و طول L را روی انرژی حالت پایه یافت. برای مقایسه، مقادیر انرژی حالت پایه برای مقدارهای مختلف G از حدس دوم و سوم و مرجع [15] در جدول 2 آورده شده است. با توجه به جدول 2، با افزایش مقدار G ، اختلاف مقادیر به دست آمده، افزایش می‌یابد. همچنین نتایج این جدول نشان از بهتر بودن حدس دوم و سوم دارد.

جدول 2 مقایسه مقدار انرژی حالت پایه معادله 20، به دست آمده از حدس‌های مختلف و مقایسه آنها با مرجع [15].

تابع موج	مقدار انرژی در $G=0$	مقدار انرژی در $G=0.25$	مقدار انرژی در $G=0.5$	مقدار انرژی در $G=0.75$	مقدار انرژی در $G=1$	مقدار انرژی در $G=2$
مرجع [15]	2,4674011	2,0899647	1,7073972	1,3192815	0,92515883.	-0,7222874
حدس اول	2,5	2,142857143	1,78571428	1,4285714	1,071428571	-0,3571428
حدس دوم	2,46743740	2,090160275	1,70757332	1,3194437	0,925560677	-0,7106341
حدس سوم	2,4674011	2,089814110	1,70688578	1,3183820	0,924084500	-0,7141909



شکل 3. نمودار انرژی حالت پایه در معادله 20 در $L=1$ - حدس اول (نقطه چین)، دوم (خط چین) سوم (خط نقطه) و مرجع 15 (خط پر).



شکل 2. نمودار تابع‌های موج حالت پایه در معادله 20 در $G=1$ و $L=1$: حدس اول (نقطه چین)، دوم (خط نقطه) سوم (خط چین) و مرجع 15 (خط پر).

بررسی چاه کوآنتومی در حضور برهم‌کنش الکترون-الکترون

برای پتانسیل $V(x) = 0,226 \cos(\pi(1 - \frac{x}{L}))$ معادله

این مسئله به صورت

$$21 \quad \frac{1}{2} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \left(0,226 \cos(\pi(1 - \frac{x}{L})) - G |\psi(x)|^2 \right) \psi(x) = E \psi(x)$$

درمی‌آید.

با استفاده از حدس اول مقدار انرژی پایه برابر است با $W \approx 2,2911899 - 1,4285714LG$ همچنین

مقادیر به‌دست آمده از حدس دوم و سوم در جدول شماره 3 آمده است. همان‌طور که از این معادله دیده می‌شود یک تابع کاهش‌ی برحسب LG داریم. مقایسه این مقدار برای W با مقدار به‌دست آمده برای معادله 20 نشان می‌دهد که افزودن پتانسیل به معادله 20 (که در اینجا به معادله 21 انجامیده است) تنها عرض از مبدأ نمودار W برحسب LG را تغییر می‌دهد و روی شیب آن تأثیری ندارد. نمودار تابع موج حالت پایه و نمودار انرژی حالت پایه برحسب تغییرات G ، به ترتیب در شکل‌های 4 و 5 آمده است.

جدول 3. مقایسه مقدار انرژی حالت پایه معادله 18، به‌دست آمده از حدس‌های مختلف و مقایسه آن‌ها با [19].

مقدار انرژی	مقدار انرژی	مقدار انرژی	مقدار انرژی	مقدار انرژی	مقدار انرژی	مقدار انرژی
در $G=0$	در $G=-0.25$	در $G=-0.5$	در $G=-0.75$	در $G=-1$	در $G=-2$	تابع موج
2,23862960	2,616951848	2,99059549	3,35989571	3,725158948	5,150920390	مرجع 19
2,29118992	2,648332778	3,00547563	3,36261849	3,719761350	5,148332778	حدس اول
2,23965567	2,616388283	2,98822823	3,35542283	3,718222056	5,130352682	حدس دوم
2,23884872	2,616373320	2,98790351	3,35403367	3,715288611	5,120001512	حدس چهارم

بررسی معادله گراس-پیتا افسکی برای چگالیده بوز-اینشتین در حضور برهم‌کنش‌های دو جسمی و سه جسمی

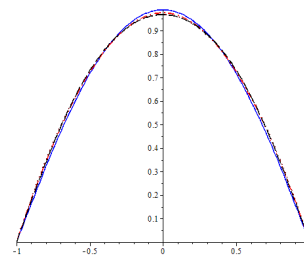
این مسئله را در حالتی بررسی می‌کنیم که $V(x) = 0$ چرا که اثر $V(x)$ را در حالت قبل دیده‌ایم. در این صورت به حل معادله

$$22 \quad \frac{1}{2} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + (U - G |\psi(x)|^2 + D |\psi(x)|^4) \psi(x) = E \psi(x)$$

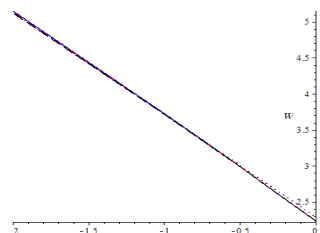
می‌پردازیم. با استفاده از حدس اول مقدار انرژی برابر است با

$$23 \quad W \approx 2,5 - 1,4285714LG + 1,1238761D$$

همچنین مقادیر به‌دست آمده از حدس دوم در جدول شماره 4 آمده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود



شکل 4. نمودار انرژی حالت پایه معادله 21 در $L=1$: حدس اول (نقطه چین)، دوم (خط نقطه) سوم (خط چین) و مرجع 19 (خط پر).



شکل 5. نمودار انرژی حالت پایه معادله 21 در $L=1$: حدس اول (نقطه چین)، دوم (خط نقطه) سوم (خط چین) و مرجع 19 (خط پر).

مشاهده قطر اصلی جدول، مشاهده می‌کنیم که با افزایش G و D (با مقادیر یکسان)، مقدار انرژی حالت پایه کاهش پیدا می‌کند. لذا برهم‌کنش دو جسمی دارای قدرت بیشتری در مقایسه با برهم‌کنش سه جسمی است.

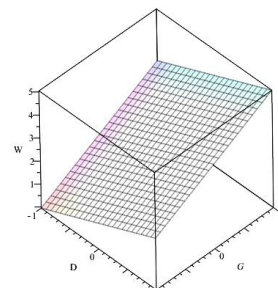
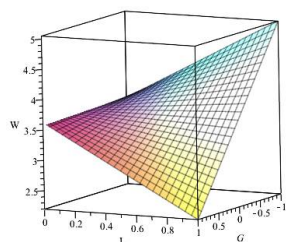
ضریب LG همچنان همان مقدار قبلی است ولی در اینجا یک ضریب جدید برای D داریم. نمودار انرژی حالت پایه برحسب تغییرات G و D ، در شکل 6 و نمودار انرژی حالت پایه برحسب تغییرات G و L ، در شکل 7 آمده است. با توجه به جدول 4، با افزایش ضریب غیر خطی G در D ثابت، مقدار انرژی حالت پایه کاهش، با افزایش ضریب غیر خطی D در G ثابت، انرژی حالت پایه افزایش پیدا می‌کند. همچنین با

جدول 4. مقایسه مقدار انرژی حالت پایه معادله 22، به دست آمده از حدس اول در $L=1$.

D	-1	-0,5	0	0,5	1
G					
-1	2,804695305	3,366633367	3,928571429	4,490509491	5,052447552
-0,5	2,090409590	2,652347652	3,214285714	3,776223776	4,338161838
0	1,376123876	1,938061938	2,5	3,061938062	3,623876124
0,5	0,661838161	1,223776224	1,785714286	2,347652348	2,909590410
1	-0,5244755	0,509490509	1,071428571	2,633366633	2,195304695

جدول 5. مقایسه مقدار انرژی حالت پایه معادله 22، به دست آمده از حدس دوم در $L=1$.

D	-1	-0,5	0	0,5	1
G					
-1	2,690622801	3,342075700	2,928525892	4,466519247	4,968303806
-0,5	2,891537870	2,586507650	3,207065044	3,771249462	4,293161507
0	1,065868886	1,808372105	2,467437405	3,061637171	3,606707032
0,5	0,212916519	1,005849650	1,707573326	2,335820058	2,907414089
1	-0,66710104	0,177684441	0,925560675	1,591871496	2,193617435



شکل 6. نمودار انرژی حالت پایه معادله 22 از حدس اول در $L=1$.

شکل 7. نمودار انرژی حالت پایه معادله 22 از حدس اول در $D=1$.

نتایج و بحث

ضریب غیر خطی D ، افزایش می‌یابد. این تغییرات در شکل شماره 6 نشان داده شده است. بنابراین در می‌یابیم که در مسأله چگالیده بوز-اینشتین، تأثیر برهم‌کنش دو جسمی در مقایسه با برهم‌کنش سه جسمی بر انرژی حالت پایه بیشتر است. همچنین در شکل 7، مشاهده می‌شود که با افزایش طول سیستم و یا با افزایش ضریب غیرخطی G ، انرژی حالت پایه کاهش پیدا می‌کند.

مرجع‌ها

[1] J.P. Martikainen, H.T.C. Stoof, Vortex-Line Solitons in A Periodically Modulated Bose-Einstein Condensate, *Physical Review Letters* **93** (2004)070402.

[2] R. Balakrishnan, Soliton propagation in nonuniform media, *Physical Review A* **32**(1985) 1144-1149.

[3] B. Malomed, Nonlinear Schrödinger Equations, *Encyclopedia of Nonlinear Science, New York, Routledge* (2005) 639-643.

[4] S.W. Kim, S. Kim, The structure of eigenmodes and phonon scattering by discrete breathers in the discrete nonlinear Schrödinger chain, *Physica D: Nonlinear Phenomena* **141** (2000) 91-103.

[5] Z. Xu, H. Han, Absorbing boundary conditions for nonlinear Schrödinger equations, *Physical Review B* **74** (2006) 037704-037704-4.

[6] M. Zaccaro, M. Arevalillo, S. Abraham, A group-theory method to find stationary states in nonlinear discrete symmetry systems, *Computer Physics Communications* **181**(2010) 35-42.

[7] V.E. Veksirchik, V.V. Kontop, Discrete nonlinear Schrodinger equation under non vanishing boundary conditions, *Inverse Problems* **8**(1992) 889- 909.

[8] S.S. Xie, G. X. Li, S. Yi, Compact finite difference schemes with high accuracy for one-dimensional nonlinear Schrödinger equation,

در این مقاله، معادله شرودینگر غیرخطی مربوط به یک نانوسیم باردار با لایه مولکولی قطبیده نرم، چاه کوآنتومی در حضور برهم‌کنش الکترون-الکترون، معادله گراس-پیتا افسکی برای چگالیده بوز-اینشتین در حضور برهم‌کنش‌های دوجسمی و سه جسمی بررسی شد. با توجه به دشوار بودن محاسبه انرژی حالت پایه این معادله‌ها با روش‌های تحلیلی، انرژی حالت پایه به کمک روش حساب تغییرات اویلر-لاگرانژ و استفاده از حدس‌های ساده و مناسب محاسبه شد. در ادامه با مقایسه یافته‌های روش‌های موجود در مقالات اخیر با نتایج حاصل از روش ترکیبی حساب تغییرات و حدس، دقت بالای این روش نشان داده شد. نکته قابل توجه در استفاده از حدس‌ها این بود که برعکس آنچه در معادله شرودینگر خطی دیده می‌شود، مشاهده کردیم که به ازای برخی از مقادیر ضرایب غیرخطی، ممکن است مسئله کمینه سازی برای معادلات غیرخطی جواب نداشته باشد. همچنین با توجه به جدول شماره 2، شکل شماره 3 و مقایسه جدول‌های 4 و 5، با افزایش ضریب غیرخطی G ، مشاهده می‌کنیم که اختلاف بین مقدار دقیق و حدس‌های دوم و سوم کمتر است و اختلاف بین مقدار دقیق و حدس اول بیشتر است که دلیل آن نداشتن ضریب وردش است و این امر اهمیت استفاده از توابع حدس با پارامترهای وردشی را نشان می‌دهد. در مسئله چاه کوآنتومی در حضور برهم‌کنش الکترون-الکترون، با مقایسه شکل‌های 3 و 5 مشاهده می‌کنیم که با افزودن پتانسیل به معادله 20، تنها عرض از مبدأ نمودار W برحسب LG را تغییر می‌کند و مقدار شیب ثابت است. در مسأله چگالیده بوز-اینشتین در حضور برهم‌کنش‌های دوجسمی و سه جسمی با توجه به جدول 4، مشاهده می‌کنیم که انرژی حالت پایه با افزایش ضریب غیرخطی G ، کاهش و با افزایش

Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **41** (2008) 015301.

[19] S.M.A. Aleomraninejad, M. Solaimani, M. Mohsenyazadeh, L. Lavaei, Discretized Euler-Lagrange Variational Method applied to Cosine Shaped Quantum Wells: An Optical Rectification Coefficient Study, *submitted*.

Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering **198** (2009)1052-1060.

[9] A. Alexandrescu, J.R. Salgueiro, Efficient numerical method for linear stability analysis of solitary waves, *Computer Physics Communications* **182** (2011)2479-2485.

[10] A. Chaves, J. Costae Silva, J.A.K. Freire, G.A. Faria, Excitonic properties of type-I and type-II Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells, *Journal of Applied Physics* **101** (2007)113703.

[11] Y. Zhang, L.j. Shi, G. Jin, B. Zou, Magnetic-field modulated exciton-exciton interaction in semiconductor microcavities, *Journal of Applied Physics* **107** (2010)053527.

[12] M. Solaimani, S.M.A. Aleomraninejad, Study of a Superlattice Nanowire with a Soft Polar Molecular Layer, *Conference on Many Body Systems (Bulk and Nano-Scale)*, Tehran-Iran (2015).

[13] S. Gasiorovicz, *Quantum physics*, John Wiley, New York (1996)

[14] 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 ZrO₂/SiO_xN_y/n-Si CMOS gate stack: A combined photoemission and inverse photoemission study, *physica status solidi* **241** (2004)2246-2252.

[15] V.A. Lykah, E.S. Syrkin, Soft polar molecular layers adsorbed on charged nanowire, *Condensed Matter Physics* **7** (2004)805-812.

[16] E. Diez, F. Dominguez-Adame, A. Sanchez, Nonlinear resonant tunneling through double-barrier structures, *Physics Letters A* **198** (1995)403-406.

[17] L. Khaykovich, B.A. Malomed, Deviation from one dimensionality in stationary properties and collisional dynamics of matter-wave solitons, *Physical Review A*. **74**(2006)023607

[18] F.K. Abdullaev, R.M. Galimzyanov, K.N. Ismatullaev, Collective excitations of a BEC under anharmonic trap position jittering,