Electronic properties of two dimensional semiconducting Nano-systems, by using few numerical approaches: meshless, finite element and finite difference methods

Mehrzad Ghorbani[1,*], Mehdi solaimani[2]

[1]Department of mathematics, Qom University of Technology, Qom, Iran
[2]Department of Physics, Qom University of Technology, Qom, Iran

Received: 30.07.2019 Final revised: 25.09.2020 Accepted: 19.01.2021

Doi link: 10.22055/JRMBS.2021.16521

Abstract

In this paper, we have studied the electronic structure of few two dimensional semiconducting nano-systems by suing three numerical methods meshless, finite element and finite difference. These methods .have been used to solve the two dimensional stationary Schrodinger equation w and the results have been compared. In order to solve the applied problems in the computational semiconducting quantum electronics, it is usually needed to solve the two dimensional stationary Schrodinger equation which have special numerical complexities. Evaluation of the energy eigenvalues is a challenging problem in this field of study. Here, by applying the methods on five applied examples we have shown that the eigenvalues converge to the exact values from lower bound in the finite difference method and converge to the exact values from upper bound in the finite element method. Therefore, in general applied problems under research, that we have not analytic eigenvalues and solutions, we are confidently able to find the upper and lower bounds of the eigenvalues. Finally, we have shown that in the mentioned examples, the meshless method has maximum accuracy among the investigated methods.

Keywords: Two dimensional Schrodinger equations, meshless methods, finite element method, finite difference method, multiquadric radial basis functions

*Corresponding Author: ghorbani@qut.ac.ir

This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

بررسی ویژگی‌های الکترونی نانوسیستم‌های نیم‌رسانای دوبعدی با کمک روش‌های عددی بدون شبکه، عناصر محدود و تفاضل محدود

مهرزاد قربانی[1,*] مهدی سلیمانی [2]

[1]گروه ریاضی، دانشگاه صنعتی قم، قم، ایران

[2]گروه فیزیک، دانشکده مکانیک، دانشگاه صنعتی قم، قم، ایران

دریافت: 1398/05/08 ویرایش نهائی: 1399/07/04 پذیرش: 1399/10/30

Doi link: 10.22055/JRMBS.2021.16521

چکیده

در این مقاله، با استفاده از سه روش عددی تفاضلات متناهی، عناصر متناهی و بدون شبکه ساختار الکترونی تعدای از نانو سیستم‌های دو بعدی با کمک حل عددی معادلهٔ شرودینگر دو بعدی مورد بررسی و مقایسه قرار می‌گیرد. برای حل مسائل کاربردی حوزه الکترونیک کوآنتومی محاسباتی نیم رساناها اغلب نیاز به حل عددی معادلات شرودینگر دو بعدی می‌باشد که این مسائل عموماً به‌خاطر عدم وجود جواب‌های تحلیلی دارای پیچیدگی‌های محاسباتی خاص خود می‌باشند. محاسبهٔ ویژه‌مقادیر، یکی از مهمترین چالش‌های این حوزه می‌باشد. در اینجا، با کمک پنج مثال متنوع کابردی، نشان داده شده است که تحت شرایط مفروض، اندازه ویژه‌مقادیر مسئله، در روش تفاضلات محدود از پایین و در روش المان محدود از بالا به مقادیر واقعی نزدیک می‌شود. بنابراین در صورت نیاز به دقت بالا برای یک مسئله عمومی کاربردی که حل تحلیلی آن وجود ندارد، با کمک این دو روش می‌توان تقریبی از کران بالا و پایین و بازه‌ای برای ویژه‌مقادیر یافت. در ادامه نشان داده شده، روش بدون شبکه بالاترین دقت را در بین روش‌های ارائه شده برای مثال‌های مورد بررسی دارد.

کلیدواژگان: معادلهٔ شرودینگر دو بعدی، روش‌های بدون شبکه، روش‌های اجزاء متناهی، روش‌های تفاضلات متناهی، توابع پایه‌ای شعاعی

مقدمه

امروزه برای انجام یک پژوهش می‌توان از رهیافت‌های مختلف تجربی، نظری و محاسباتی که پس از ورود رایانه به عصر جدید فناوری، نگرشی جدید برای بررسی مسائل ایجاد نموده و انجام تحقیقات را به‌طور شگفت‌آوری سرعت بخشیده است استفاده کرد. علت استفاده روز افزون از کامپیوتر و نرم افزارهای محاسباتی این است که در علوم پایه و مهندسی، تعداد مسائلی که دارای حل تحلیلی و دقیق باشند محدود هستند. برای مثال، در مکانیک کوآنتومی تعداد پتانسیل‌هایی که معادلهٔ شرودینگر تک ذره‌ای آنها با یک روش تحلیلی قابل حل باشد(مانند پتانسیل مربوط به ذره در جعبه، پتانسیل مورس، پتانسیل پوشل-تلر[1]) زیاد

* نویسنده مسئول: ghorbani@qut.ac.ir

[1]Poschel-Teller

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.
این مقاله تحت مجوز کریتیو کامنز تخصیص 4,0 بین‌المللی می‌باشد

نیستند و در حالت کلی پتانسیل، تضمینی برای وجود جواب تحلیلی وجود ندارد. در هنگام محاسبات نیز معمولاً به میزان دقت، سرعت روش‌ها، بازهٔ صحت و سایر نکات آنالیزی و تئوری کمتر توجه می‌شود با اینکه حل معادلات شرودینگر غیروابسته به زمان کاربردهای زیادی در حوزه‌های مختلف فیزیک از قبیل محاسبه ویژگی‌های نوری [1]، رسانش [2]، شیفت دیامغناطیسی [3]، اثر فرانز-کلدیش [4]، انرژی بستگی ناخالصی‌های دهنده [5] و انتقال اشتراک آنها [6]، تشکیل ریزنوارها [7]، و غیره برای نانوساختارهای نیم‌رسانا دارد.

در عمل، به‌دلیل دشوار بودن حل کلی شکل دو بعدی این نوع معادلات [8]، محققین ترجیح می‌دهند با روش‌هایی نظیر جداسازی متغیرها این معادلات را به چند معادلهٔ یک بعدی ساده‌تر تقلیل دهند تا مسائل بزرگ به مسائل کوچک تبدیل شده و حل آنها ساده‌تر شود که این کار همیشه میسر نیست و مستلزم خطاست و به کاهش دقت نتایج محاسبات منجر می‌شود. در واقعیت نیز تعداد مسائلی که توسط روش‌های جدایی پذیر می‌توانند منجر به معالات یک بعدی شوند زیاد نیستند و مسائل واقعی اغلب چند بعدی، پیچیده و غیر قابل جداسازی هستند و گاهی با اندکی دستکاری، به معادلات جفت شده یا سیستمی از معادلات منجر می‌شوند. موارد گفته شده اهمیت توجه کلی به‌روش‌های حل حالت چند بعدی این نوع معادلات را روشن می‌کند. برای مثال گفته می‌شود که حل تحلیلی برای معادلات شرودینگر برای یافتن حالات الکترونی تعداد زیادی از نانوساختارها ممکن نیست و محققین از روش‌های عددی نظیر: حساب وردشی [9]، روش پتانسیل وزنی [10]، روش سری فوریه [11-12]، روش ماتریس انتقال [13]، روش تفاضلات محدود [14-16]، روش عناصر محدود [17-18]، روش تکرار مجانبی[1][19]، گروه بازنرمالش ماتریس چگالی[2][20]، قطری سازی دقیق[21]، الگوریتم ژنتیک[22]، روش تحلیل هموتوپی هی[3][23]، روش نومروف[4][24]، روش رانگ کوتا[25-26]، روش تیر اندازی[27]، و غیره برای این منظور استفاده می کنند. ولی بررسی‌های مقایسه‌ای برای انتخاب روش بهینه با تمرکز بر روی یک مسئله ویژه‌مقداری مانند معادلهٔ شرودینگر دو بعدی با ضریب متغیر (تابع پتانسیل)، کمتر انجام شده است. بدلیل سادگی، مرسوم‌ترین روش برای حل معادلات شرودینگر روش تفاضل متناهی بوده است [8]. ولی این روش دارای مشکلاتی است. مثلاً با رفتن از یک بعد به دو و سه بعد، اگر تعداد برش‌ها در هر جهت N باشد، ابعاد ماتریس به‌ترتیب N، N^2 و N^3 خواهد بود [28]. بنابراین به‌سادگی قابل مشاهده است که برای داشتن یک دقت حداقلی، ابعاد ماتریس شرودینگر در دو و سه بعد و در نتیجه حجم محاسبات به‌سرعت افزایش می‌یابد. این امر با استفاده از ماتریس‌های تنک[5] تا حدی قابل کنترل است ولی قطری سازی ماتریس‌های بسیار بزرگ، هرچند تنک، با دشواری‌های دیگری همراه است. از این رو محققان از روش‌های دیگری مثل اجزاء محدود، قطری سازی دقیق و غیره هم استفاده می‌کنند. با این وجود، حل عددی معادلهٔ شرودینگر دو بعدی با کمک روش بدون شبکه کمتر مورد توجه قرار گرفته است. در مطالعه کنونی، هدف ما مقایسه سه روش بدون شبکه، عناصر محدود و تفاضل محدود برای حل معادلات شرودینگر دوبعدی نوع استاتیک و غیر وابسته به‌زمان است. در مجموع، الف: تعیین کران بالا و پایین برای ویژه‌مقادیر

[1] Asymptotic iteration method
[2] Density matrix renormalization group
[3] He’s homotopy perturbation method
[4] Numerov method
[5] sparse

یک معادلهٔ شرودینگر دو بعدی که حل تحلیلی برای آن نداریم، ب: مقایسهٔ دقت سه روش مختلف با شبکه و بدون شبکه برای حل عددی معادلهٔ شرودینگر دو بعدی و ج: ارائه فرم مشروح و اعمال روش بدون شبکه برای محاسبهٔ ویژه‌مقادیر و ویژه‌توابع معادله شرودینگر دوبعدی از نوآوری‌های این مقاله است. لازم به‌ذکر است که در روش اجزاء متناهی از روش باقیمانده وزنی گالرکین و در روش بدون شبکه از روش هم محلی استفاده شده است. تمام توابع پایه‌ای دارای پارامترهای باز هستند که انتخاب مقدار آنها قاعده خاصی ندارد و به‌صورت تجربی انجام می‌شود. سادگی الگوریتم روش‌های بدون شبکه، درجه همواری بالای آنها، استقلال از شبکه و موضعی بودن از مزایای این نوع روش است. بخش‌های این مقاله عبارتند از: در بخش1 فرمولبندی ارائه می‌شود. در بخش2 روش قدیمی‌تر تفاضلات متناهی و پس از آن در بخش3 روش اجزاء متناهی توضیح داده می‌شود. روش بدون شبکه موضوع بخش4 می‌باشد. در بخش5 نتایج عددی ارائه می‌شود و سپس نکاتی به‌عنوان پیشنهاد داده می‌شود. در پایان لازم به‌ذکر است که روش‌های ارائه شده در این مقاله به تمامی پتانسیل‌های غیر تکین قابل اعمال است. ولی اگر پتانسیل تکین باشد می‌توان از روش‌های دیگر مثل روش سینک نیز [29] استفاده نمود.

فرمولبندی

معادلهٔ شرودینگر دو بعدی غیروابسته به زمان (ایستا) در تقریب جرم مؤثر و با کمک تقریب تابع پوش استفاده کرده‌ایم و با شکل کلی زیر مورد نظر است:

$$\left(-\alpha\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)+V(x,y)\right)\psi(x,y) = E\psi(x,y) \qquad 1$$

که در اینجا دامنهٔ مسئلهٔ مورد نظر به‌شکل مستطیلی $\Omega = [a_x, b_x] \times [a_y, b_y]$ می‌باشد. تابع پتانسیل $V(x,y)$ معلوم بوده و ما فرم صریح آن را در مثال‌های مورد نظر به‌صورت‌های متنوع در بخش نتایج و بحث می‌آوریم. پارامتر α ضریبی ثابت و معلوم است. E ویژه‌مقدار، نامعلوم و حل عددی ویژه‌تابع مجهول $\psi(x,y)$ مورد نظر است.

روش تفاضل محدود

به‌منظور حل معادلهٔ1 با روش تفاضلات متناهی باید از تقریب‌های متنوعی برای مشتقات مراتب مختلف استفاده نمود، به‌عنوان مثال برای مشتق اول:

$$f'(x) \simeq \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{3!}f^3 - .... \qquad 3$$

و به‌همین صورت برای مشتق دوم داریم:

$$f''(x) \simeq \frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12}f^4 \qquad 4$$

که در آن $-\frac{h^2}{6}f^3$ و $-\frac{h^2}{12}f^4$ عبارات خطایی برشی نامیده می‌شوند. با کمک این تقریب و برش‌زنی، در نهایت عملگرهای مشتق به شکل یک سیستم ماتریسی تبدیل می‌شوند. بنابراین اگر N_x و N_y تعداد برش‌ها در طول محورهای x و y باشند می‌توان معادلهٔ1 را به‌صورت زیر نوشت:

$$-\alpha\left(\frac{\psi(x_n+\Delta x, y_m)-2\psi(x_n,y_m)+\psi(x_n-\Delta x, y_m)}{\Delta x^2} + \frac{\psi(x_n, y_m+\Delta y)-2\psi(x_n,y_m)+\psi(x_n, y_m-\Delta y)}{\Delta y^2}\right) + V(x_n,y_m)\psi(x_n,y_m) = E\psi(x_n,y_m) \qquad 5$$

این معادله را به‌صورت ساده‌تر زیر بازنویسی می‌کنیم:

$$-\alpha\left(\frac{\psi_{n+1,m}-2\psi_{n,m}+\psi_{n-1,m}}{\Delta x^2} + \frac{\psi_{n,m+1}-2\psi_{n,m}+\psi_{n,m-1}}{\Delta y^2}\right) + V_{n,m}\psi_{n,m} = E\psi_{n,m} \qquad 6$$

که در آن $n = 0,1,\ldots N_x$ و $m=0,1,\ldots N_y$. اکنون می‌توان نوشت:

$$\left(\hat{H} - E\hat{I}\right)\psi_n = 0 \qquad 7$$

که در آن $\hat{H}$ ماتریس هامیلتونی و $\hat{I}$ ماتریس همانی و هر دو با ابعاد $(Nx \times Ny) \times (Nx \times Ny)$ می‌باشند. معادلهٔ 7 یک معادلهٔ ویژه‌مقداری ماتریسی با مجهول E است که باید با استفاده از روش‌های جبر خطی عددی حل شود. برای دستیابی به‌دقت خوب، لازم است تعداد تقسیم‌بندی شبکه افزایش داده شود یا تظریف شبکه صورت گیرد، همچنین به‌دلیل تنک بودن ماتریس هامیلتونی، در اینجا از الگوریتم آرنولدی برای قطری‌سازی آن استفاده می‌کنیم. الگوریتم آرنولدی در ضمیمهٔ 1 شرح داده شده است.

روش عناصر محدود

در روش عناصر محدود، دامنهٔ مسئلهٔ مورد نظر که ممکن است دارای شکل هندسی پیچیده و نامنظم باشد، به‌تعدادی زیردامنه، غیرهمپوشانی به‌نام عنصر یا جزء با شکل هندسی منظم مانند مربع، مستطیل یا مثلث تقسیم می‌شود و سپس توابع پایه‌ای روی عناصر یا نقاط گوشه‌ای آنها تعریف می‌شوند. اگر n_x و n_y تعداد گره‌ها در طول محورهای x و y باشند، برای حالت منظم، اندازه گام مربوطه در این جهات $h_x = \frac{1}{n_x}$ و $h_y = \frac{1}{n_y}$ می‌باشد. همچنین داریم $0 = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n_x} = 1$، $y_j = a_y + jh_y$، $0 = y_0 < y_1 < \ldots < y_{n_y} = 1$، $x_i = a_x + ih_x$. اکنون، توابع پایه‌ای دو خطی بر روی عناصر مستطیلی به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\varphi_{i,j}(x,y) = \begin{cases} \frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i}\frac{y_{j+1}-y}{y_{j+1}-y_j} & , x_i \le x \le x_{i+1}, y_j \le y \le y_{j+1} \\ \frac{x_{i-1}-x}{x_{i-1}-x_i}\frac{y_{j+1}-y}{y_{j+1}-y_j} & , x_{i-1} \le x \le x_i, y_j \le y \le y_{j+1} \\ \frac{x_{i-1}-x}{x_{i-1}-x_i}\frac{y_{j-1}-y}{y_{j-1}-y_j} & , x_{i-1} \le x \le x_i, y_{j-1} \le y \le y_j \\ \frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i}\frac{y_{j-1}-y}{y_{j-1}-y_j} & , x_i \le x \le x_{i+1}, y_{j-1} \le y \le y_j \\ 0 & , \quad Otherwise \end{cases} \qquad 8$$

که در آن $i = 0,1,\ldots n_x$ و $j = 0,1,\ldots n_y$. تعداد کل نقاط برابر $(1+n_x) \times (1+n_y)$ است. از آنجایی که توابع پایه در مرزهای فضایی صفر می‌باشند، نقاط روی مرزها در محاسبات وارد نمی‌شوند. بنابراین تعداد مجهولات (و در نتیجه تعداد معادلات جبری) برابر تعداد نقاط درونی دامنه یعنی برابر $(n_x - 1) \times (n_y - 1)$ است. اکنون تقریب عناصر محدود تابع موج معادلهٔ 1 را با ترکیب خطی توابع پایه ذکر شده در بالا (معادلهٔ 8) و به صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$\tilde{\psi}(x,y) = \sum_{i=0,j=0}^{n_x-1,n_y-1} u_{i,j}\varphi_{i,j}(x,y) \qquad 9$$

که در آن $u_{i,j}$ها مجهولات مسئله در نقاط درونی دامنه یا تلاقی عناصر مستطیلی مورد نظر هستند. برای سادگی انجام محاسبات، از عناصرهم پارامتر[1] شده یا عناصر یکه با تغییر متغیرهای $\xi = \frac{x - x_i}{h_x}$ و $\eta = \frac{y - y_j}{h_y}$ کمک می‌گیریم که از نگاشت عناصر فیزیکی به‌عناصر محاسباتی به‌دست می‌آیند. بنابراین توابع پایه‌ای 8 را به‌صورت زیر می‌نویسیم:

$$\varphi_{i,j}(\xi,\eta) = \begin{cases} (1-\xi)(1-\eta) & , 0 \le \xi \le 1, 0 \le \eta \le 1 \\ (1+\xi)(1-\eta) & , -1 \le \xi \le 0, 0 \le \eta \le 1 \\ (1+\xi)(1+\eta) & , -1 \le \xi \le 0, -1 \le \eta \le 0 \\ (1-\xi)(1+\eta) & , 0 \le \xi \le 1, -1 \le \eta \le 0 \\ 0 & , \quad Otherwise \end{cases} \qquad 10$$

از آنجایی که در همسایگی نقاط درونی (x_i, y_j)، 9 نقطه و 4 عنصر داریم، بنابراین ماتریس سختی

[1] Isoparametric elements

هامیلتونی نهایی معادلهٔ1، تنک و نواری بوده و حداکثر 9 لایهٔ قطری غیر صفر دارد و بنابراین یک ماتریس بلوکی سه-قطری[1] می‌شود. هر یک از این بلوک‌ها، مربعی، 4×4 و متقارن هستند. اکنون با جای‌گذاری درونیاب8 در معادلهٔ1، مانده را به‌صورت زیر می‌یابیم:

$$R(x,y) = \alpha\Delta\tilde{\psi}(x,y) + V(x,y)\tilde{\psi}(x,y) - E\tilde{\psi}(x,y) \quad ; \quad x \in \Omega \qquad 11$$

که در حالت کلی مخالف صفر است، سپس با کمک روش گالرکین داریم:

$$\iint_{\Omega} R(x,y)\varphi_{i,j}(x,y)dxdy = 0, \quad i=1,\dots n_x-1,\ j=1,\dots n_y-1 \qquad \text{الف}12$$

به‌طور دقیقتر و محدود به تکیه‌گاه عناصر می‌توان نوشت:

$$\int_{y_{j-1}}^{y_{j+1}}\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} R(x,y)\varphi_{i,j}(x,y)dxdy = 0 \qquad \text{ب}12$$

و پس از تغییر متغیر و نرمالیزه‌سازی متغیرها داریم:

$$\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} R(\xi,\eta)\varphi_{i,j}(\xi,\eta)h_x h_y d\xi d\eta = 0 \qquad \text{ج}12$$

در ادامه برای حل انتگرال12، به‌حالت خاصی از قضیه گرین به‌صورت زیر نیاز داریم: [30]

$$\iint_{\Omega}\Phi\Delta\tilde{U}d\Omega + \iint_{\Omega}\nabla\Phi\bullet\nabla\tilde{U}d\Omega = \iint_{\Gamma}\Phi\frac{\partial\tilde{U}}{\partial n}d\Gamma \qquad 13$$

به‌خاطر شرایط مرزی دیریکله و تباهیده[2] و در نتیجه با حذف انتگرال مرزی، این معادله را می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$\iint_{\Omega}\Phi\Delta\tilde{U}d\Omega = -\iint_{\Omega}\nabla\Phi\bullet\nabla\tilde{U}d\Omega \qquad 14$$

جواب نهایی حاصل از این روش، از نوع ضعیف، تعمیم یافته و از ردهٔ C^0 است. با کمک انتگرال‌گیری از معادلات12 سه نوع ماتریس بلوک-سه-قطری (روی اقطار1+، 0، 1-) داریم. برای ماتریس M_1 عناصر ماتریسی در نقاط(i,j) ، (i+1,j) ، (i,j+1) و (i+1,j+1) به‌ترتیب برابر $\frac{1}{3h_x^2}+\frac{1}{3h_y^2}$، $-\frac{1}{3h_x^2}+\frac{1}{6h_y^2}$، $\frac{1}{3h_y^2}-\frac{1}{6h_x^2}$ و $-\frac{1}{6h_x^2}-\frac{1}{6h_y^2}$ است. برای ماتریس M_2 عناصر ماتریسی در نقاط (i,j) ، (i+1,j) ، (i,j+1) و (i+1,j+1) به ترتیب برابر $\int_0^1\int_0^1 V(\xi,\eta)(1-\eta)^2(1-\xi)^2 d\xi d\eta$، $\int_0^1\int_0^1 V(\xi,\eta)(1-\eta)^2(1-\xi)\xi d\xi d\eta$، $\int_0^1\int_0^1 V(\xi,\eta)\eta(1-\eta)(1-\xi)^2 d\xi d\eta$ و $\int_0^1\int_0^1 V(\xi,\eta)\eta\xi(1-\eta)(1-\xi)d\xi d\eta$ است. برای ماتریس M_3 عناصر ماتریسی در نقاط (i,j) ، (i+1,j) ، (i,j+1) و (i+1,j+1) به ترتیب برابر $\frac{1}{3.3}$، $\frac{1}{6.3}$، $\frac{1}{3.6}$ و $\frac{1}{6.6}$ است. بعد از محاسبه ماتریس‌های بزرگ M_1، M_2 و M_3، سیستم معادلات خطی ویژه مقداری تعمیم یافته زیر تولید خواهد شد:

$$-\alpha M_1\psi + M_2\psi = EM_3\psi \qquad 15$$

که در آن E ویژه‌مقادیر انرژی و ψ ویژه توابع متناظر را به ما خواهد داد.

روش بدون شبکه

در روش بدون شبکه با توابع پایه ای شعاعی به منظور تقریب معادلهٔ1، تابع پایه شعاعی چند مربعی[3] زیر را انتخاب می‌کنیم [31-32]:

[1] blocked tri-diagonal
[2] degenerate
[3] multi-quadric

$$\phi_j(x) = \sqrt{(x-x_j)^2+(y-y_j)^2+c_{rbf}^2} \quad ; \; j=0,1,2,\ldots N \qquad 16$$

که در آن c_{rbf} یک پارامتر آزاد، کوچک و مثبت است که به‌صورت تجربی انتخاب می‌شود. در روش تقریب بدون شبکه مورد نظر، تقریب تابع موج به‌صورت زیر و از ترکیب خطی توابع پایه بر روی نقاط درونی دامنه انتخاب می‌شود:

$$\tilde{\psi}(p)=\sum_{j=0}^{N}\alpha_j\phi_j(p) \qquad 17$$

که در آن ضرایب α_j برای $j=0,1,2,\ldots,m$، مجهولات مسئله هستند و $p=(x,y)$، $p_j=(x_j,y_j)$. در اینجا، توزیع نقاط $\{p_j\}_{j=0}^{N}$ را به‌طور یکنواخت (نه تصادفی محض و نا منظم) و در دامنه و روی مرز دامنه انتخاب کرده‌ایم. با کمک روش هم‌مکانی یا هم‌محلی[1] روی نقاط $\{p_j\}_{j=0}^{N}$ به سیستم معادلات خطی زیر می‌رسیم:

$$\tilde{\psi}(p_i)=\sum_{j=0}^{N}\alpha_j\phi_j(p_i) \quad ; \; i=0,1,\ldots,N \qquad 18$$

که سیستم فوق، به‌صورت ماتریسی و فشرده زیر تبدیل می‌شود:

$$\Psi=A\alpha \qquad 19$$

بنابراین $\alpha = A^{-1}\psi$. با جایگزینی عبارت α در معادلهٔ17 به‌رابطهٔ بدون α زیر می‌رسیم:

$$\tilde{\psi}(p)=\left[\varphi_0(p),\varphi_1(p),\ldots,\varphi_N(p)\right]\alpha =\left[\varphi_0(p),\varphi_1(p),\ldots,\varphi_N(p)\right]A^{-1}\Psi \qquad 20$$

اکنون اگر

$$\left[\eta_0(p),\eta_1(p),\ldots,\eta_N(p)\right]=\left[\varphi_0(p),\varphi_1(p),\ldots,\varphi_N(p)\right]A^{-1} \qquad 21$$

معادلهٔ17 را می‌توان به‌صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\tilde{\psi}(p)=\sum_{j=0}^{N}\eta_j(p)\psi_j \qquad 22$$

که در آن توابع $\eta_j(p)$ساخته شده از طریق روش بدون شبکه دارای خاصیت درونیابی می‌باشند یعنی $\eta_j(p_i)=\delta_{\{i,j\}}$. در ادامه از بسط 22 استفاده کرده تا جواب تقریبی معادلهٔ1 را بیابیم. برای این منظور از رابطهٔ22 برای یافتن مانده، به‌صورت زیر استفاده می‌شود:

$$R(p)=\alpha\Delta\tilde{\psi}(p)+V(p)\tilde{\psi}(p)-E\tilde{\psi}(p) \qquad 23$$

با کمک روش هم‌مکانی (روش باقیمانده وزندار با وزن دلتای دیراک) داریم:

$$R(p_i)=0 \; ; \; i=0,1,\ldots,N \qquad 24$$

در این معادله از نقاط مرزی صرف نظر می‌کنیم زیرا مقادیر آنها در مرز معلوم و برابر صفر است. بنابراین به بسط زیر می‌رسیم:

$$\alpha\sum_{j=0}^{N}\psi_j\Delta\eta_j(p_i)+V(p_i)\sum_{j=0}^{N}\psi_j\eta_j(p_i)-E\sum_{j=0}^{N}\psi_j\eta_j(p)=0 \; ; \; i=0,1,\ldots,N \qquad 25$$

حال اگر ماتریس های زیر را تعریف کنیم:

$$M_1=\alpha\left\{\Delta\eta_j(p_i)\right\}_{i,j=0}^{N} \qquad \text{الف}26$$

$$M_2=\left\{V(p_i)\eta_j(p_i)\right\}_{i,j=0}^{N} \qquad \text{ب}26$$

$$M_3=\left\{\eta_j(p_i)\right\}_{i,j=0}^{N} \qquad \text{ج}26$$

معادله ویژه‌مقداری تعمیم یافته زیر ساخته می‌شود:

$$M_1\psi+M_2\psi=(M_1+M_2)\psi=EM_3\psi \qquad 27$$

که در آن E ویژه‌مقادیر انرژی و بردارهایψ ویژه توابع متناظر هستند.

[1] Collocation

نتایج و بحث:

در این بخش به‌منظور مقایسهٔ روش‌های ارائه شده در بالا، به بررسی تعدادی مثال خواهیم پرداخت. در ابتدا با مقایسه این روش‌ها با مقادیر دقیق، دقت روش‌ها را بررسی خواهیم کرد. سپس با ارائه مثال‌های کابردی در فیزیک، قدرت روش‌ها را در حل مثال‌های واقعی‌تر خواهیم آزمود. در روش المان محدود از پایه‌های مربعی استفاده کرده‌ایم.

ضریب α در معادلهٔ1 در مثال‌های زیر با کمک رابطه $\alpha = \hbar^2 / 2m^*$ به‌دست آمده است. جرم مؤثر استفاده شده نیز برابر $m^*=0/068m_0$ در نظر گرفته شده است. طول‌ها هم به یک آنگستروم نرمال شده‌اند.

مثال1:

یک ذره محبوس شده در جعبهٔ کوآنتومی دو بعدی با فرض $V(x,y)=0$ در معادلهٔ1 به‌دست می‌آید. در اینجا چاه کوآنتومی متشکل از نیم‌رسانای GaAs با طول چاه $L_x = L_y = 100$ و ضریب $\alpha = 56.0292$ را مورد بررسی قرار خواهیم داد. پاسخ‌های دقیق به‌صورت زیر خواهند بود [33]:

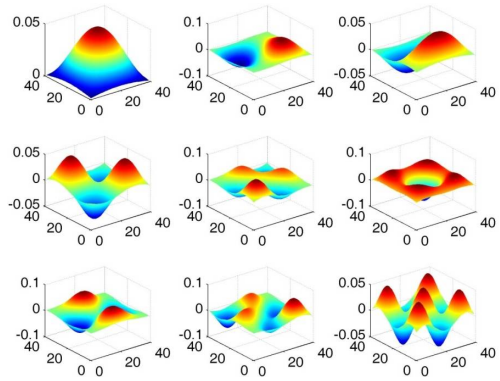
$$E_{n,m}^{exact} = \pi^2 \alpha \left(\frac{n^2}{L_x^2} + \frac{m^2}{L_y^2} \right); \; n,m = 1,2,... \qquad 28$$

جدول1 نتایج عددی حاصل از حل معادلهٔ1 را به‌دست می‌دهد. در این جدول 10 ویژه‌مقدار کمترین را نشان می‌دهد. این جداول برای نشان دادن این نکته که دقت هر کدام از روش‌ها چه میزان است، ارائه شده‌اند. همچنین از روی این جداول می‌توان کمیت‌های دیگری نظیر انرژی‌های گذار زیرنواری و ویژگی‌های جذب نور در این سیستم‌های نانوساختاری نیم‌رسانا را نیز به‌دست آورد که هدف این مقاله نیست. همان‌طور که از این جدول بر می‌آید، در روش تفاضل محدود ویژه‌مقادیر پایین‌تر دارای دقت بالاتری است و با افزایش شماره ویژه‌مقدار دقت کم می‌شود. برای افزایش دقت روش تفاضل محدود، تعداد برش‌ها در هر جهت را از 20 به 50 افزایش دادیم که دقیقتر شدن روش با مقایسه نتایج با مقادیر دقیق مشهود است. در این مثال روش المان محدود در تعداد برش یکسان از دقت کمتری از روش تفاضل محدود برخوردار است. در روش المان محدود نیز ویژه‌مقادیر پایین‌تر دارای دقت بالاتری است و با افزایش شماره ویژه‌مقدار دقت کم می‌شود.

جدول1. ده ویژه‌مقدار پایین مثال1.

	FDM(20*20)	FDM(50*50)	FEM (20*20)	FEM (30*30)	Meshless(20*20)	Exact
E_1	0.110391	0.110562	0.110848	0.110698	0.110948	0.110597
E_2	0.2747448	0.276196	0.278431	0.277353	0.277556	0.276493
E_3	0.2747444	0.276196	0.278431	0.277353	0.277556	0.276493
E_4	0.439098	0.441829	0.4460392	0.444008	0.444848	0.442389
E_5	0.544585	0.551554	0.562376	0.5571432	0.554671	0.552986
E_6	0.544585	0.551554	0.562376	0.5571432	0.555072	0.552986
E_7	0.708939	0.717187	0.729983	0.7237982	0.723085	0.718882
E_8	0.708939	0.717187	0.729983	0.7237982	0.723085	0.718882
E_9	0.913884	0.935591	0.969664	0.9531379	0.942811	0.940076
E_{10}	0.913884	0.935591	0.969664	0.9531379	0.942811	0.940076

ولی در روش بدون شبکه، ویژه‌مقادیر بالاتر نیز دارای دقت بالایی هستند. بنابراین دقیق‌ترین روش در این مثال، روش بدون شبکه و کم‌دقت‌ترین روش، روش المان محدود است. در مجموع، مقایسه‌ها نسبی است و می‌توان با ارتقای هر روش، جواب‌های بهتری به‌دست آورد. در روش عناصر متناهی، از توابع پایه‌ای دوخطی استفاده شده است. در شکل1 توابع موج متناظر با ده کمترین ویژه‌مقدار در مثال1 نشان داده شده است.



شکل1. توابع موج متناظر با 9 کمترین ویژه مقدار در مثال1.

مثال2:

در این مثال یک نوسانگر هماهنگ دوبعدی با پتانسیل $V(x,y)=0.5m^{*}\left(x^{2}+y^{2}\right)$ و پارامترهای اولیه $\alpha=1/2m^{*}$ و $m^{*}=1$ و طول بازه L=12 برای هر دو جهت x و y در نظر گرفته‌ایم.

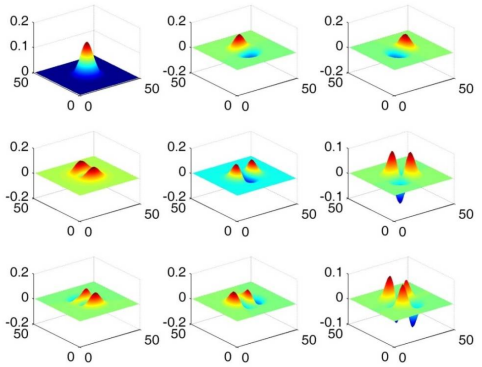
جدول2. ده ویژه مقدار پایین مثال2.

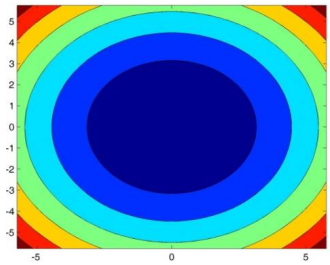
	FDM(20*20)	FDM(50*50)	FEM(20*20)	FEM(30*30)	Meshless (20*20)	Exact
E_1	0.979147	0.996527	1.022368	1.009972	1.000287	1
E_2	1.936454	1.989558	2.065695	2.029643	2.001033	2
E_3	1.936454	1.989558	2.065695	2.029643	2.001033	2
E_4	2.848291	2.975557	3.109022	3.049313	3.002332	3
E_5	2.848291	2.975557	3.149300	3.068401	3.002676	3
E_6	2.893760	2.982589	3.149300	3.068401	3.003229	3
E_7	3.710465	3.954447	4.192627	4.088071	4.004918	4
E_8	3.710465	3.954447	4.192627	4.088071	4.004918	4
E_9	3.805597	3.968588	4.269797	4.125620	4.007320	4
E_{10}	3.805597	3.968588	4.269797	4.125620	4.007320	4

مقادیر دقیق ویژه‌مقدارهای انرژی از رابطه زیر به‌دست می‌آید [33]:

$$E_{n,m}^{exact}=(n+0.5)+(m+0.5);\ \ n,m=0,1,2,...$$

الف





ب

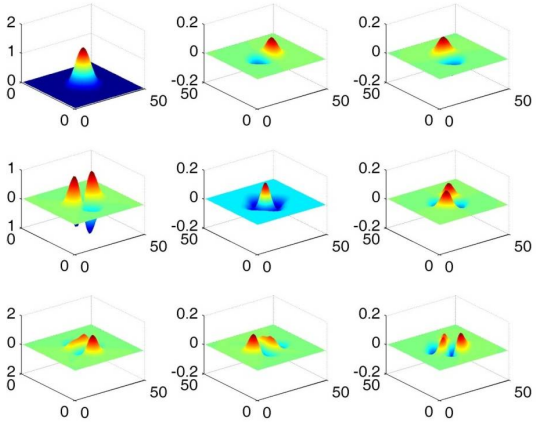
شکل2. الف: توابع موج متناظر با 9 کمترین ویژه مقدار در مثال 2 ب: شکل پتانسیل.

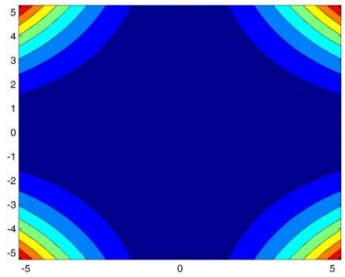
در این مثال نیز، دقیقترین روش، روش بدون شبکه و کم‌دقت‌ترین روش، روش المان محدود است ولی دقت روش بدون شبکه به‌طور قابل توجهی از دو روش دیگر بیشتر است. در شکل2 نیز توابع موج متناظر با ده عدد از کمترین ویژه مقدار، در مثال2 نشان داده شده است. همان‌طور که می‌دانیم، قله تابع موج روی دره تابع پتانسیل قرار می‌گیرد به‌شرطی که چاه پتانسیل ایجاد شده به‌اندازهٔ کافی عمیق باشد. در این شکل مشاهده می‌کنیم که تابع پتانسیل باعث متمرکز شدن توابع موج در مرکز سیستم یعنی کمینهٔ تابع پتانسیل ارائه شده در این شکل شده است. این جمع شدن، می‌تواند با مقایسه توابع موج شکل2 و شکل1 حاصل شود. چرا که در شکل1 که تابع پتانسیل نداریم، توابع موج در کل دامنه فضایی مورد بررسی گسترده شده‌اند.

مثال3:

در این مثال، شکل پتانسیل از مرجع [34] به‌شکل $V(x,y)=\left(1+x^2\right)(1+y^2)$ انتخاب شده است. همچنین ضریب در معادلهٔ 1 برابر $\alpha=1$ و طول سیستم در راستاهای x و y برابر L=11 در نظر گرفته شده است.

الف





ب

شکل3. الف: توابع موج متناظر با 9 کمترین ویژه مقدار در مثال 3. ب: شکل پتانسیل.

نتایج برای ده ویژه‌مقدار اول و ده ویژه‌بردار اول در جدول3 و شکل3 داده شده است.

مثال4:

در این مثال یک سیم کوآنتومی به‌شکل V با شکل پتانسیل $V(x,y)=\begin{cases}0 & ; \ y_1(x)<y<y_2(x)\\ 1 & ; \ Otherwise\end{cases}$ و ضرایب $\alpha=1$ و L=20 و $\theta=\pi/5$ و width=3 و b=2 و $y_1(x)=-b*\tan(\theta)*Ln\left(\cosh\left(x/b\right)\right)+width/2$ و $y_2(x)=y_1(x)-width$ در نظر گرفته شده است.

جدول3. ده ویژه‌مقدار پایین مثال3.

	FDM(20*20)	FDM(50*50)	FEM(20*20)	FEM(30*30)	Meshless (20*20)	Ref [11]
E_1	3.146789	3.187701	3.249227	3.219600	3.196260	3.195918
E_2	5.369534	5.500721	5.692529	5.601087	5.528214	5.526743
E_3	5.369534	5.500721	5.692529	5.601087	5.528214	5.526743
E_4	7.205337	7.500379	7.914983	7.719975	7.561474	7.557803
E_5	7.673628	7.973031	8.393104	8.195617	8.036155	8.031272
E_6	8.083469	8.384999	8.822033	8.614419	8.449989	8.444581
E_7	9.281328	9.824692	10.554777	10.216450	9.937653	9.928061
E_8	9.281328	9.824692	10.554777	10.216450	9.937653	9.928061
E_9	10.621810	11.199414	12.010264	11.629373	11.326691	11.311817
E_{10}	10.621810	11.199414	12.010264	11.629373	11.326691	11.311817

جدول4. ده ویژه‌مقدار پایین مثال4.

	FDM (20*20)	FDM (50*50)	FEM (20*20)	FEM (30*30)	Meshless (20*20)
E_1	0.404723	0.434559	0.452695	0.446504	0.436988
E_2	0.513227	0.529109	0.546016	0.539169	0.527796
E_3	0.572534	0.608164	0.630255	0.620870	0.609990
E_4	0.739132	0.749946	0.779216	0.765290	0.761614
E_5	0.863626	0.894499	0.940092	0.920185	0.916752
E_6	1.012672	1.085495	1.101847	1.099330	1.085048
E_7	1.070434	1.094259	1.140625	1.116045	1.096337
E_8	1.171426	1.174796	1.184586	1.179613	1.174212
E_9	1.172484	1.177421	1.185461	1.181489	1.177525
E_{10}	1.191685	1.262532	1.101847	1.116045	1.244563

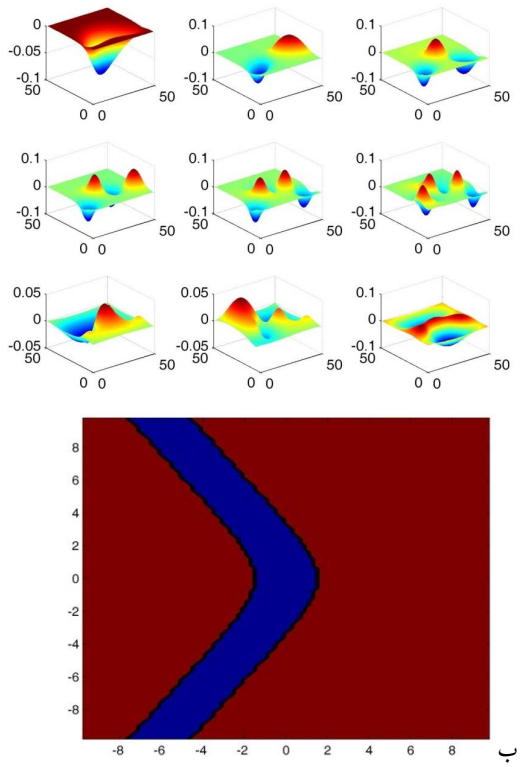
این شکل پتانسیل برگرفته ازشده از مراجع [35-36] می‌باشد. این یک مثال کاربردی است که برای بررسی ویژگی‌های نوری سیم‌های کوآنتومی استفاده می‌شود. با کمک این ساختارها می‌توان حسگرهای نوری در بازه فرکانسی تراهرتز ساخت. نزدیک بودن ویژه‌مقادیر به‌دست آمده از روش‌های مختلف نشان دهنده همگرایی روش‌ها به‌مقادیر واقعی می‌باشد.

مثال5:

در این مثال، شکل پتانسیل $V(x,y)=\left(\sin^2\left(\frac{\pi x}{L_x}\right)+\sin^2\left(\frac{\pi y}{L_y}\right)\right)$، با ضریب $\alpha=1$ و طول $L_x=L_y=20$ در نظر گرفته شده است. این شکل

پتانسیل می‌تواند برای ساختن شبکه‌های نوری مورد استفاده قرار گیرد. نتایج برای ده ویژه‌مقدار اول و ده ویژه‌بردار اول در جدول5 و شکل5 داده شده است.

الف



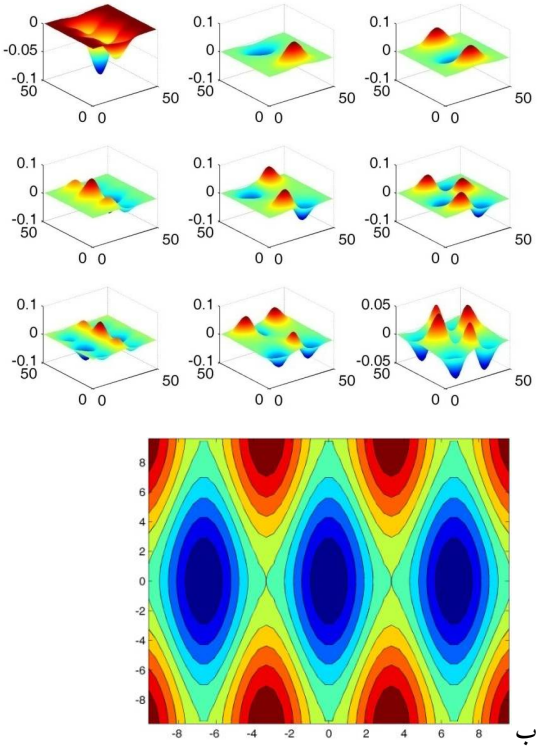
ب

شکل4. الف: توابع موج متناظر با 9 کمترین ویژه مقدار در مثال 4. ب: شکل پتانسیل.

جدول5. ده ویژه مقدار پایین مثال5.

	FDM (20*20)	FDM (50*50)	FEM (20*20)	FEM (30*30)	Meshless (20*20)
E_1	0.530424	0.537743	0.548284	0.543278	0.539455
E_2	0.562792	0.570539	0.581581	0.576356	0.572975
E_3	0.582350	0.590552	0.602209	0.596699	0.592884
E_4	0.813436	0.824211	0.839816	0.832404	0.826703
E_5	0.845804	0.857007	0.873113	0.865481	0.860430
E_6	0.865362	0.877020	0.893741	0.885824	0.880265
E_7	1.064780	1.080982	1.104224	1.093230	1.084660
E_8	1.097149	1.113778	1.137521	1.126308	1.118447
E_9	1.116707	1.133791	1.158149	1.146651	1.138304
E_{10}	1.130118	1.146527	1.168916	1.158454	1.150474

الف



ب

شکل5. الف: توابع موج متناظر با 9 کمترین ویژه‌مقدار در مثال 5. ب: شکل پتانسیل.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، سه روش عددی: 1) تفاضلات متناهی، 2) اجزاء محدود و 3) روش توابع پایه‌ای شعاعی چند مربعی بدون شبکه برای حل مسئله دوبعدی شرودینگر غیر وابسته زمانی و مسئله ویژه‌مقداری بر روی دامنه مستطیلی با شرایط مرزی همگن تباهیده و در شرایط یکسان (از نظر تعداد گره‌ها)، در قالب پنج مثال با پتانسیل‌های مختلف، متنوع و پر کاربرد در زمینه‌های مختلف فیزیکی مانند نانو اعمال شده و نتایج عددی حاصل با دقت بالا با همدیگر و با جواب دقیق مقایسه شده‌اند. روش تفاضلات متناهی، تقریب روی نقاط شبکه را می‌دهد. روش عناصر محدود، جواب از نوع ضعیف و تعمیم یافته، به‌صورت تابع از رده C^0 می‌دهد.

همچنین، روش بدون شبکه جواب کلاسیک و به‌صورت تابع هموار از رده C^{∞} به ما می‌دهد. سه روش عددی به‌کار رفته در این مقاله برای دیگر معادلات با بعدهای مختلف، معادلات وابسته زمانی، با دامنه‌های با شکل هندسی غیر مربعی و با شرایط مرزی نیومان و مخلوط قابل تعمیم است. همچنین نشان داده شد که تحت شرایط مفروض، اندازه ویژه‌مقادیر مسئله، در روش تفاضلات محدود از پایین و در روش المان محدود از بالا به مقادیر واقعی نزدیک می‌شود.

مرجع‌ها

[1] M. Solaimani, M. Ghalandari, L. Lavaei, Donor impurity effects on optical properties ofG aN/AlN constant total effective radius multishell quantum dots, *Journal of the Optical Society of America B* **33** (2016)420-125.https://doi.org/10.1364/JOSAB.33.000420

[2] J. Burki, C.A. Stafford, X. Zotos, D. Baeriswyl, Cohesion and conductance of disordered metallic point contacts, *Physical Review B*, **60** (1999) 5000-5008. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.5000

[3] X.Z. Duan, X.J. Kong, Electron and hole states and the exciton diamagnetic shifts in an InAs/InP rectangular quantum wire in a magnetic field, *Journal of Applied Physics* **104** (2008) 113720. https://doi.org/10.1063/1.3039800

[4] B.S. Monozon, P. Schmelcher, Resonant Franz-Keldysh exciton effect in the narrow biased quantum wire subjectnto a strong magnetic field, *Physical Review B* **79** (2009) 165314. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.165314

[5] E. Kasapoglu, H. Sari, I. Sokmen, Geometrical effects on shallow donor impurities in quantum wires, *Physica E* **19** (2003) 332-335. https://doi.org/10.1016/S1386-9477(03)00382-5

[6] M. Solaimani, Stark shift of binding energy for on and off-center donor impurities in quantum rings under the influence of charged rods electric fields, *Solid State Sciences* **108** (2020) 106386. https://doi.org/10.1016/j.solidstatescienceS.2020.106386

[7] M. Solaimani, Miniband Formation in GaN/AlN Constant-Total-Effective-Radius Multi-shell Quantum Dots, *Chinese Physics Letters*. **32** (2015) 117304. https://doi.org/10.1088/0256-307X/32/11/117304

[8] C. Galeriu, L.C. Lew Yan Voon, R. Melnik, M. Willatzen, Modeling a nanowire superlattice using the finite difference method in cylindrical polar coordinates, *Computer Physics Communications*, **157** (2004) 147-159. https://doi.org/10.1016/S0010-4655(03)00493-4

[9] J.S. Dehesa, J.A. Porto, F.A. Rueda, F. Meseguer, Electronic energy levels of quantum well wires, *Journal of Applied Physics*, **73** (1993)5027-5031. https://doi.org/10.1063/1.353772

[10] Y. Tsuji, M. Koshiba, Analysis of complexeigenenergies of an electron in two- and three-dimensionally confined systems using the weighted potential method, *Microelectronics Journal*, **30** (1999) 1001-1006. https://doi.org/10.1016/S0026-2692(99)00062-2

[11] S. Gangopadhyay, B.R. Nag, Energy levels in finite barrier triangular and arrowhead-shaped quantum wires, *Journal of Applied Physics*, **81** (1997). 7885-7889. https://doi.org/10.1063/1.365361

[12] J.S. Walker, *Fourier Analysis*, Oxford Univ. Press (1988).

[13] A. Mayer, Band-structure and transport calculations in quantum wires using a transfer-matrix technique, *Physical*

[22] R. Saha, P. Chaudhury, S.P. Bhattacharyya, Direct solution of Schrödinger equation by genetic algorithm: test cases, *Physics Letters A* **291** (2001) 397-406. https://doi.org/10.1016/S0375-9601(01)00704-6

[23] J. Biazar, H. Ghazvini, Exact solutions for non-linear Schrödinger equations by He's homotopy perturbation method, *Physics Letters A* **366** (2007) 79-84. https://doi.org/10.1016/j.physleta.2007.01.060

[24] M. Pillai, J. Goglio, T.G. Walker, Matrix Numerov method for solving Schrödinger's equation, *American Journal of Physics* **80** (2012) 1017. https://doi.org/10.1119/1.4748813

[25] H. Van de Vyver, Comparison of some special optimized fourth-order Runge–Kutta methods for the numerical solution of the Schrödinger equation, *Computer Physics Communications* **166** (2005) 109-122. https://doi.org/10.1016/j.cpc.2004.11.002

[26] J.D. Lambert, *Numerical methods for ordinary differential systems*, Wiley (1991).

[27] M. Solaimani, S. M. A. Aleomraninejad, Optical Properties of Energy-Dependent Effective Mass GaAs/GaxIn$_{1-x}$As and GaAs/AlxGa$_{1-x}$As Quantum Well Systems: A Shooting Method Study, *J. Electron. Mater.* **48** (2019) 942-950. https://doi.org/10.1007/s11664-018-6813-5

[28] D. El-Moghraby, R.G. Johnson, P. Harrison, Calculating modes of quantum wire and dot systems using a finite differencing technique, *Computer Physics Communications* **150** (2003) 235-246. https://doi.org/10.1016/S0010-4655(02)00690-2

[29] K. Nouroozi, S.M.A. Aleomraninejad, M. Solaimani, B. Farnam, Computation of the linear Schrodinger Energy levels by Sinc method, *Journal of New Researches in Mathematics*, **3** (2017) 81-90.

Chemistry News, **16** (2004) 46-53. http://dx.doi.org/10.1116/1.3698600

[14] P. Sudhira, B.K. Panda, S. Fung, C.D. Beling Electric field effect on the diffusion modified AlGaAs/GaAs single quantum well, *Journal of Applied Physics*, **80** (1996) 1532-1540. https://doi.org/10.1063/1.362948

[15] G.D. Smith, *Numerical Solution Of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*, Oxford University Press (1986).

[16] C.A.J. Fletcher, *Computational Techniques for Fluid Dynamics I*, Springer (1988).

[17] R. Samir, P. Hideaki, E.B. Harvey Quasibound states in semiconductor quantum well structures, *Superlattices and Microstructures*, **47** (2010) 288–299. https://doi.org/10.1016/j.spmi.2009.10.016

[18] B. Dietrich, *Finite elements: theory, fast solvers, and applications in elasticity theory*, Cambridge University Press (2007).

[19] H. Ciftci, R.L. Hall, N. Saad, Asymptotic iteration method for eigenvalue problems, *Journal of Physics A: Mathematical Gen.* **36** (2003) 11807–11816. https://doi.org/10.1088/0305-4470/36/47/008

[20] M.A. Martin-Delgado, G. Sierra, R.M. Noack, The density matrix renormalization group applied to single-particle quantum mechanics, *Journal of Physics A: Mathematical Gen.* **32** (1999) 6079-6090. https://doi.org/10.1088/0305-4470/32/33/306

[21] D.V. Melnikov, L.-X. Zhang, J.-P. Leburton, Exchange coupling between two electrons in double quantum dot structures, *Current Opinion in Solid State and Materials Science* **10** (2006) 114-119. https://doi.org/10.1016/j.cossms.2006.11.004

http://jnrm.srbiau.ac.ir/article_11165_fa.html

[30] G.B. Arfken, H.J. Weber, F.E. Harris, *Mathematical Methods for physics*, Academic Press (2012).

[31] M. Ghorbani, Diffuse Element Kansa Method, *Applied Mathematical Sciences*, *4* (2010) 583-594. http://www.m-hikari.com/ams/ams-2010/ams-9-12-2010/ghorbaniAMS9-12-2010.pdf

[32] L. Jichun, Y.C. Honb, C.S. Chen Numerical comparisons of two meshless methods using radial basis functions, Engineering Analysis with Boundary Elements, 26 (2002) 205-225. https://doi.org/10.1016/S0955-7997(01)00101-1

[33] S. Gasiorowicz, *Quantum Physics*, John Wiley. (2003).

[34] L.G. Ixaru, New numerical method for the eigenvalue problem of the 2D Schrödinger equation, *Computer Physics Communications*, **181** (2010) 1738-1742. https://doi.org/10.1016/j.cpc.2010.06.031

[35] R. Khordad, Diamagnetic susceptibility of hydrogenic donor impurityinaV-grooveGaAs/Ga1-xAlxAs quantum wire, *European Physical Journal B* **78** (2010)399-403https://doi.org/10.1140/epjb/e2010-10290-x

[36] E. Sadeghi, R. Khordad, Analytical solution for V-groove quantum wire with an effective potential scheme, physica status solidi B, 242(2005) 1628-1635. https://doi.org/10.1002/pssb.200540051

ضمیمهٔ الف: روش آرنولدی[1]

ویژه‌بردارهای ماتریس مربعی می‌تواند با ترکیب خطی بردارهای $v_0, Av_0, \ldots, A_{m-1}v_0$ که در آن v_0 یک بردار دلخواه انتخابی اولیه است تقریب زده شود و m باید به اندازه کافی بزرگ باشد. در فضای کریولو[2] داریم:

$$K_m = \left\{ x \mid x = \sum_{i=0}^{m-1} a_i A^i v_0 \right\} \qquad \text{الف1}$$

فرض کنید $V_m = [v_1 \ldots v_m]$ یک پایه ارتونرمال برای K_m است آنگاه هر ستون AV_m ترکیب خطی از ستونهای V_{m+1} خواهد بود.

$$Av_1=v_1h_{11}+v_2h_{21} \qquad \text{الف2}$$

اکنون با کمک فرض اورتونرمال بودن پایه داریم:

$$v_1TAv_1=h_{11} \text{ and } v_2Av_1=h_{21} \qquad \text{الف3}$$

$$Av_2=v_1h_{12}+v_2h_{22}+v_3h_{32}, \qquad \text{الف4}$$

پس: الف5

$$v_1TAv_2=h_{12},\ v_2TAv_2 = h_{22} \text{ and } v_3TAv_2=h_{32}$$

به فرم ماتریسی می‌توان نوشت:

$$[Av_1\ Av_1\ \cdots\ ] = [v_1\ v_1\ \cdots\ ]\begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots \\ h_{21} & h_{22} & \cdots \\ 0 & h_{32} & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \cdots \end{bmatrix} \qquad \text{الف6}$$

[1]Arnoldi Method

[2]Krylov space

A و V_m ماتریس های $n\times n$ هستند و H یک ماتریس هسنبرگ[1] $(m+1)\times m$ است. بنابراین:

$$V_m^T A V_m = V_m^T V_{m+1} H = H = (1:m,1:m) \quad \text{الف}7$$

پس به‌ازای مقادیر به‌اندازهٔ کافی بزرگ m، ویژه‌مقادیر H با تقریب خوبی برخی از ویژه‌مقادیر A خواهند بود و ویژه بردارهای متناظر A می‌تواند با $V_m x$ تقریب زده شود که $Hx=\lambda x$. در اینجا H یک ماتریس $m\times m$ است که $m < n$.).

[1]Hessenberg