УДК 51-72:530.145

СИМВОЛЬНО-ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С ДВУХЪЯМНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

А.Н. Лукьяненко, Н.А. Чеканов

ГОУ ВПО «Белгородский государственный университет»,
г. Белгород

Рецензент В.Ф. Калинин

Ключевые слова и фразы: волновые функции; компьютерная алгебра; метод самосогласованного базиса; спектр; уравнение Шредингера.

Аннотация: В работе показан метод самосогласованного базиса для решения двумерного уравнения Шредингера, гамильтониан которого является инвариантным относительно дискретной группы C_{2v} с поверхностью потенциальной энергии, имеющей два локальных минимума и единственную седловую точку. С помощью разработанной символьно-численной программы в среде Maple получены основные уравнения в аналитическом виде, а также проведен численный расчет нижних уровней энергии и волновых функций.

Введение. Решения уравнения Шредингера в явном виде могут быть найдены для ограниченного числа потенциалов [1]. Поэтому разработано и развивается достаточно большое количество как приближенных аналитических, так и прямых численных методов, из которых наиболее широко применяемым, особенно для многомерных систем, является метод диагонализации [2]. Вычислительные трудности сильно возрастают при увеличении размерности рассматриваемой системы и усложнении вида потенциала дифференциального оператора Шредингера, для которого решается задача на собственные значения. Кроме того, точность вычислений спектра и волновых функций ухудшается, если квантовая система допускает существование динамического хаоса в классическом пределе [3]. В связи с наличием быстродействующих компьютеров и современных математических пакетов, таких как Maple, Reduce, Mathematica и др., перспективными являются комбинированные или символьно-численные методы, которые сочетают в себе аналитические преобразования, например исходного

Лукьяненко А.Н. – сотрудник БелГУ; Чеканов Н.А. – доктор физико-математических наук, профессор БелГУ, г. Белгород.

уравнения Шредингера, с последующим численным решением уже преобразованной задачи.

В настоящей работе рассматривается четырехпараметрический C_{2v} симметричный оператор Шредингера, причем его параметры выбраны так, что поверхность потенциальной энергии (**ППЭ**) имеет два локальных минимума и единственную седловую точку (рис. 1). Для этого оператора методом самосогласованного базиса [4] с помощью разработанной символьно-численной программы SELFA_C2V в среде Maple в аналитическом виде получены четыре системы дифференциальных уравнений в соответствии с наличием четырех неприводимых представлений группы C_{2v}. Для конкретных числовых значений параметров гамильтониана найдены численные решения этих систем уравнений и вычислены несколько десятков нижних уровней энергии и волновые функции всех типов (A_1, B_1, A_2, B_2) этой группы.

Классическая система. Исследуемому квантовому уравнению Шредингера соответствует классическая система, динамика которой описывается следующей функцией Гамильтона:

$$H(x, y, p_x, p_y) = \frac{1}{2}\left(p_x^2 + p_y^2\right) + V(x, y); \tag{1}$$

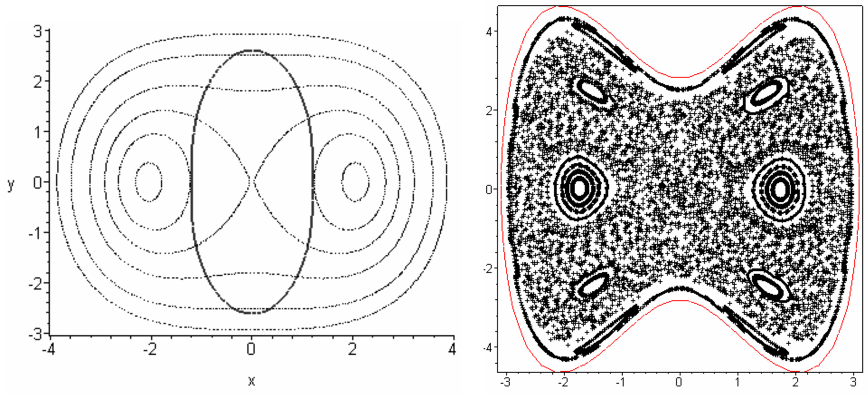
$$V(x, y) = \frac{a}{2}\left(x^2 + y^2\right) - \frac{a'}{2}x^2 + bx^2y^2 + c\left(x^2 + y^2\right)^2, \tag{2}$$

где x, y, p_x, p_y – канонически сопряженные координаты и импульсы; $V(x, y)$ – поверхность потенциальной энергии; a, a', b, c – параметры, причем в нашей задаче $a, a', c > 0$, $a' > a$ и $b \le 0$. Функция $V(x, y)$ имеет два минимума с минимальной энергией $V_{\min} = -(a' - a)^2 / 16c$ и седловую точку в начале координат, в которой $V_s = 0$ (см. рис. 1). Наличие седловой точки может указывать на возможность существования в системе хаотических режимов движения, и построенное сечение Пуанкаре (см. рис. 1) действительно указывает на существование классического хаоса в гамильтоновой системе (1). Однако, если $b = 0$ и $c = 1$ при произвольных значениях других параметров $a, a', c > 0$, то классическая система, несмотря на наличие седловой точки, является интегрируемой, так как, кроме энергии E имеется другой интеграл движения $\mathrm{Int} = \left(xp_y - yp_x\right)^2 + a'\left(p_x^2/2 + x^4 + x^2y^2 + (a - a')x^2/2\right)$, что также подтверждается проведенными вычислениями сечений Пуанкаре.

Основные уравнения метода самосогласованного базиса. Квантовым аналогом функции Гамильтона (1)–(2) является дифференциальный оператор Шредингера

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + V(x, y) \tag{3}$$

с той же ППЭ (2), для которого требуется решить уравнение Шредингера:



а) *б*)

Рис. 1. Изолинии ППЭ (пунктирные) и линия (сплошная) нулевой гауссовой кривизны (*а*) и сечения Пуанкаре для классического гамильтониана (1) ($b \neq 0$, $c \neq 0$, E = 3,923) (*б*)

$$\hat{H}\psi(x, y) = E\psi(x, y), \tag{4}$$

где E и $\psi(x, y)$ – собственные значения и собственные функции, квадратично интегрируемые на интервале $(-\infty, \infty)$. В полярных переменных (r, φ) после замены $\psi(r,\varphi) = u(r,\varphi)/\sqrt{r}$ уравнение Шредингера (4) перепишется как

$$\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right) + V(r,\varphi)\right] u(r,\varphi) = Eu(r,\varphi). \tag{5}$$

Согласно методу самосогласованного базиса его решение ищем в виде тригонометрического ряда

$$u(r,\varphi) = \frac{A_0(r)}{2} + \sum_{l=1}\left[A_l(r)\cos l\varphi + B_l(r)\sin l\varphi\right], \tag{6}$$

коэффициенты которого являются функциями от радиальной переменной r. Так как гамильтониан (3) имеет C_{2v} симметрию, то есть не изменяется относительно преобразований $\varphi \to \pm\varphi + q\pi$, q = 0, 1, то его квантовые состояния будем классифицировать по четырем неприводимым представлениям этой группы: A_1, A_2, B_1, B_2. Проектируя решение (6) на базисные тригонометрические функции, для неизвестных функций $A_0(r)$, $A_l(r)$ и $B_l(r)$, l = 1, 2, 3, …, N, … получаем бесконечные системы обыкновенных дифференциальных уравнений (**ОДУ**) II порядка, которые эквивалентным образом можно записать в виде систем ОДУ I порядка:

A_1 – тип

$$\begin{cases} z_2' + \alpha_0 z_1 + 2\beta z_3 + 2\gamma z_5 = 0; \\ z_4' + \alpha_2 z_3 + \beta(z_1 + z_5) + \gamma(z_7 + z_3) = 0; \\ z_{l+2}' + \alpha_l z_{l+1} + \beta(z_{l-1} + z_{l+3}) + \gamma(z_{l-3} + z_{l+5}) = 0\ ; \end{cases}$$

$A_l = z_{l+1}$; $A_l'' = z_{l+2}'$, $l = 4, 6, 8, \ldots$

A_2 – тип

$$\begin{cases} z_2' + \alpha_2 z_1 + \beta z_3 + \gamma(z_5 - z_1) = 0; \\ z_4' + \alpha_4 z_3 + \beta(z_1 + z_5) + \gamma z_7 = 0; \\ z_l' + \alpha_l z_{l-1} + \beta(z_{l-3} + z_{l+1}) + \gamma(z_{l-5} - z_{l+3}) = 0\ ; \end{cases}$$

$B_l = z_{l-1};\ \ B_l'' = z_l',\ l = 6,\ 8,\ 10,\ \ldots$

B_1 – тип

$$\begin{cases} z_2' + \alpha_1 z_1 + \beta z_3 + \gamma(z_3 + z_5) = 0; \\ z_4' + \alpha_3 z_3 + \beta(z_1 + z_5) + \gamma z_7 = 0; \\ z_{l+1}' + \alpha_l z_l + \beta(z_{l-2} + z_{l+2}) + \gamma(z_{l-4} + z_{l+4}) = 0\ ; \end{cases}$$

$A_l = z_l;\ \ B_l'' = z_{l+1}',\ l = 5,\ 7,\ 9,\ \ldots$

B_2 – тип

$$\begin{cases} z_2' + \alpha_1 z_1 + \beta z_3 + \gamma(z_5 - z_3) = 0; \\ z_4' + \alpha_3 z_3 + \beta(z_1 + z_5) + \gamma(z_7 - z_1) = 0; \\ z_{l+1}' + \alpha_l z_l + \beta(z_{l-2} + z_{l+2}) + \gamma(z_{l+4} - z_{l-4}) = 0\ ; \end{cases}$$

$B_l = z_l;\ \ B_l'' = z_{l+1}',\ l = 5,\ 7,\ 9,\ \ldots$

(7)

где $\alpha_l(r, E) = 2E - \dfrac{4l^2 - 1}{4r^2} - ar^2 + \dfrac{a'}{2}r^2 - \dfrac{b}{4}r^4 - 2cr^4$, $\beta = \dfrac{a'}{4}r^2$, $\gamma = \dfrac{a'}{8}r^4$.

Усекая каждую из полученных систем (7) до $2N$ уравнений, получим конечные и однородные системы ОДУ I порядка относительно неизвестных функций $z_k(r)$, причем функции $\alpha_l(r, E)$ содержат еще произвольные значения энергии E. Далее для конкретного значения E численно решаем задачу Коши для каждой из систем (7) с $2N$ начальными условиями, заданными в виде столбцов диагональной матрицы $M_{\text{init}} = \text{diag}(z_1(r_0, E), z_1'(r_0, E), z_2(r_0, E), z_2'(r_0, E), \ldots, z_N(r_0, E), z_N'(r_0, E))$, где $r_0 \to 0$ – начальная точка интегрирования, и находим фундаментальную систему решений $z_k^{(j)}(r, E)$, k, j = 1, 2, 3, …, $2N$, верхний индекс j нумерует решения задачи Коши. Тогда, как известно, общее решение системы ОДУ I порядка определяется линейными комбинациями

$$z_k(r, E) = \sum_{j=1}^{2N} C_j z_k^{(j)}(r, E), \quad k = 1, \ldots, 2N\ , \qquad (8)$$

в которых содержится и решение уравнения Шредингера (4). Полагая в уравнениях системы (8) функции $z_k(r, E)$ с нечетными номерами $k = 2m - 1$, m = 1, 2, 3,…, N в начальной r_0 и конечной r_{end} точках численного интегрирования равными нулю, получаем однородную линейную алгебраическую систему относительно неизвестных коэффициентов C_k, k = 1, 2, 3, …, $2N$:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{2N} C_j z_k^{(j)}(r_0, E) = 0; \\ \sum_{j=1}^{2N} C_j z_k^{(j)}(r_{\text{end}}, E) = 0, \quad k = 1, 3, 5, \ldots, 2N-1. \end{cases} \tag{9}$$

Нетривиальные решения системы (9) относительно C_j определяются из равенства нулю соответствующего детерминанта, который выполняется для определенных значений $E = E_n$, составляющих спектр исходного уравнения Шредингера (4). Решения, соответствующие данному значению энергии E_n, являются собственными или волновыми функции *n*-го состояния.

Результаты численных расчетов. Нами разработан алгоритм и составлена символьно-численная программа SELFA_C2V на Maple, с помощью которой на основе метода самосогласованного базиса были получены аналитические результаты, которые приведены выше, а также выполнены численные расчеты энергетических уровней и волновых функций всех типов. Численные расчеты были проведены с двумя наборами параметров: $\mathrm{I} \in \{a = 1{,}8490;\ a' = 8{,}257825;\ b = -0{,}287070;\ c = 0{,}375509\}$ и $\mathrm{II} \in \{a = 1{,}8490;\ a' = 8{,}257825;\ b = 0;\ c = 1\}$. Как было показано во втором разделе, рассматриваемая система в классическом пределе при наборе параметров I является неинтегрируемой, а при наборе II – интегрируемой.

Точность вычисления уровней энергии контролировалась выбором варьируемых значений величин r_0, r_{end} и числа уравнений 2N в системах (7) (для вычисленных уровней энергии наибольшее значение не превышало $2N$ = 36). В работе вычислены несколько десятков значений нижних энергетических уровней, структура расположения которых в потенциале (2) при наборе параметров I показана на рис. 2.

На рис. 3, 4 показаны волновые функции $\psi(x, y)$ уравнения Шредингера (4), вычисленные для набора параметров I, а на рис. 5 – для набора параметров II.

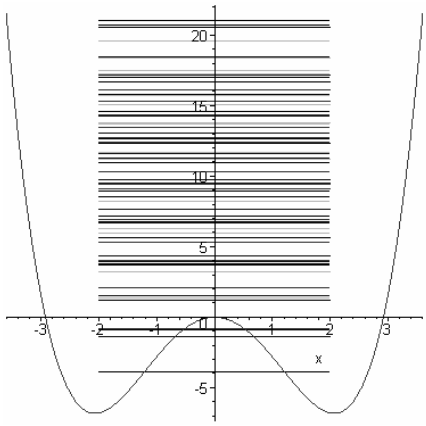
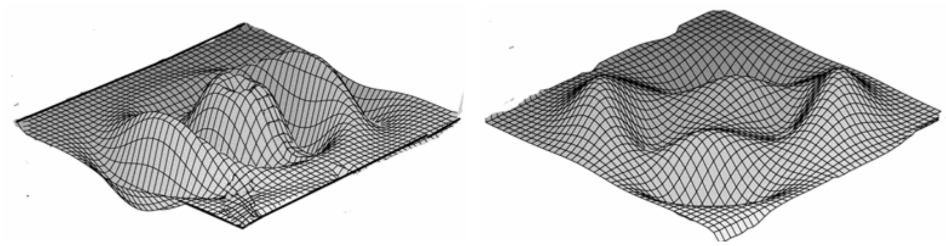
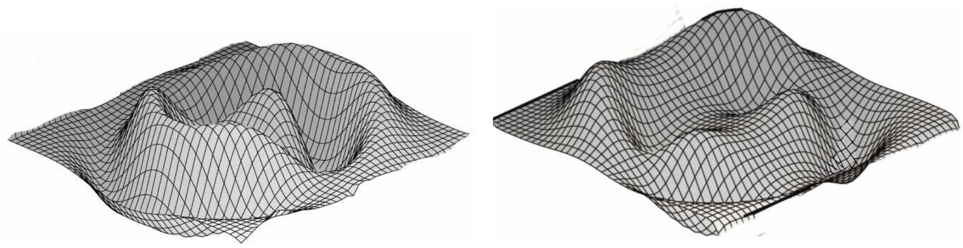


Рис. 2. Структура энергетических уровней уравнения Шредингера (4)



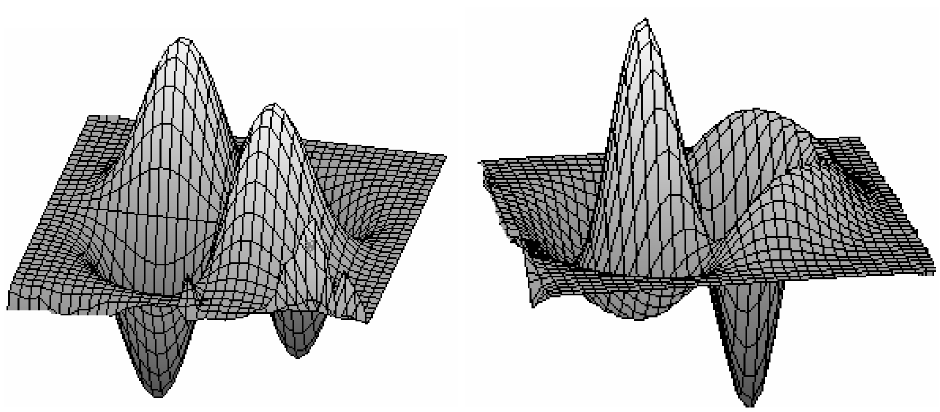
а) *б*)

Рис. 3. Рельефы волновых функций A_1-типа для уровня E = 3,68467 (*а*) и A_2-типа для уровня E = 3,92314 (*б*)



а) *б*)

Рис. 4. Рельефы волновых функций B_1-типа для уровня E = 4,03904 (*а*) и B_2-типа для уровня E = 3,91849 (*б*)



а) *б*)

Рис. 5. Рельефы волновых функций A_2-типа для уровня E = 3,92314 (*а*) и B_2-типа для уровня E = 5,32398 (*б*)

Заключение. На основе метода самосогласованного базиса разработана символьно-численная программа для решения C_{2v} симметричного двумерного уравнения Шредингера с полиномиальным двухъямным потенциалом, и вычислены нижняя часть спектра и некоторые волновые функции. В методе самосогласованного базиса исходное двумерное уравнение Шредингера сводится к бесконечной системе ОДУ, причем по одной из переменных (угловой) учтены граничные условия. Редукция базисной системы функций происходит по другой, когда бесконечная система ОДУ заменяется конечной, а по радиальной переменной проводится «точное» (численное) интегрирование, что приводит к согласованию базисных функций с видом потенциала. Это позволяет существенно повысить скорость сходимости разложений искомых решений, особенно для двумерных потенциалов со сложной многоямной формой поверхности, и, следовательно, уменьшить объем и время компьютерных вычислений.

Список литературы

1. Миллер, У. Симметрия и разделение переменных : пер. с анг. / У. Миллер ; под ред. К.И. Бабенко. – М. : Мир, 1981. – 342 с.
2. Уилкинсон, Дж. Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра / Дж. Уилкинсон, К. Райнш. – М. : Машиностроение, 1976. – 392 с.
3. Bolotin, Yu.L. The transition regularity-chaos-regularity and statistical properties of wave function / Yu.L. Bolotin, V.Yu. Gonchar, V.N. Tarasov, N.A. Chekanov // Phys. Lett. – 1990. – Vol. A144, No. 8, 9. – P. 459–461.
4. Винницкий, С.И. Препринт / С.И. Винницкий, Е.В. Инопин, Н.А. Чеканов // Объединенный институт ядерных исследований (ОИЯИ); Р4-93-150. – Дубна, 1993. – 11 с.

Symbolic-Numeric Solution to the Two-Dimensional Schroedinger Equation with Double-Well Potential

A.N. Lukyanenko, N.A. Chekanov

Belgorod State University, Belgorod

Key words and phrases: wave functions; computer algebra; self-consistent basis method; spectrum; Schroedinger equation; Maple.

Abstract: A self-consistent basis method for the solution to the C_{2v} symmetric two-dimensional Schroedinger equation with potential energy surface having two local minima and single saddle point is developed. By means of the constructed symbol-numeric Maple program the basic analytical equations are obtained and numeric calculations for the low energy levels and wave functions are performed.
