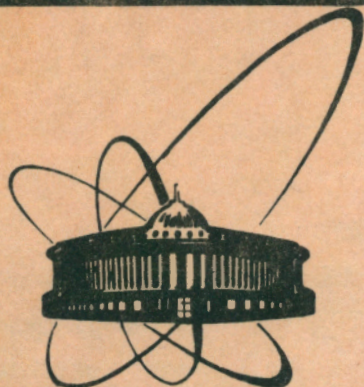


91-139



**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P11-91-139

И.В.Амирханов, Е.В.Земляная, Т.П.Пузынина

**ИТЕРАЦИОННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ
УРАВНЕНИЯ ПОЛЯРОНА
В СФЕРИЧЕСКИ СИММЕТРИЧНОМ СЛУЧАЕ**

1991

ВВЕДЕНИЕ

Среди элементарных возбуждений, известных в физике конденсированного состояния, - экситонов, фононов, магнонов и др., поляроны занимают особое место. В настоящее время, помимо чисто теоретического аспекта, проблема возбужденных поляронных состояний приобретает интерес в связи с проблемой электронного переноса возбуждений в самых различных конденсированных средах (растворы, биомакромолекулы, органические поляронные состояния и др.) ^{/1/}.

Нахождение возбужденных самосогласованных состояний в модели Латтинжера-Лу ^{/2/} в сферически симметричном случае сводится к решению системы дифференциальных уравнений ^{/3/}:

$$\begin{aligned} \Phi'' - \lambda\Phi + A \frac{V_2 - V_1}{x} \Phi &= 0 \\ V_1'' + \Phi^2/x &= 0 \\ V_2'' + CV_2 + \Phi^2/x &= 0 \end{aligned} \quad (1)$$

с условием нормировки

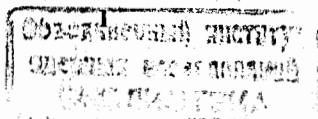
$$4\pi \int \Phi^2 dx = 1 \quad (2)$$

и с граничными условиями

$$\begin{aligned} \Phi(0) = \Phi(\infty) &= 0, \\ V_1(0) = V_1'(\infty) &= 0 \quad (V_1(\infty) = \text{const}), \\ V_2(0) = V_2(\infty) &= 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где λ , A , C - физические параметры.

В работе ^{/3/} описан метод решения краевой задачи (1)-(3) с помощью итерационной схемы на основе непрерывного аналога метода Ньютона и представлены найденные этим методом первые



пять состояний полярона, т.е. $\{\lambda_n, \Phi_n\}$, $n=0,1,2,3,4$, n - число узлов функции Φ_n .

Систему уравнений (1) можно представить в виде одного интегродифференциального уравнения:

$$\Phi'' - \lambda\Phi + V(x, \Phi)\Phi = 0, \quad (4)$$

$$\Phi(0) = \Phi(\infty) = 0, \quad 4\pi \int \Phi^2 dx = 1, \quad (5)$$

где

$$V(x, \Phi) = \frac{A}{X} \int_0^\infty D(x, x') \frac{\Phi^2(x', x')}{x'} dx' \quad (6)$$

$$D(x, x') = \begin{cases} x' - \frac{e^{-cx}}{c} \operatorname{sh}(cx'), & x' < x \\ x - \frac{e^{-cx'}}{c} \operatorname{sh}(cx), & x < x'. \end{cases} \quad (7)$$

Решения $\{\lambda_n, \Phi_n\}$ краевой задачи (4)-(5) являются также решениями задачи (1)-(3).

Предположим, что дискретный набор самосогласованных решений $\{\lambda_n, \Phi_n\}$, $n=0,1,2,\dots$ задачи (4)-(5) известен. Тогда для фиксированного поляризованного потенциала $V(x, \Phi_n)$, решая линейную краевую задачу

$$\Phi_{mn}'' - \lambda_{mn}\Phi_{mn} + V(x, \Phi_n)\Phi_{mn} = 0 \quad (8)$$

$$\Phi_{mn}(0) = \Phi_{mn}(\infty) = 0, \quad 4\pi \int \Phi_{mn}^2 dx = 1, \quad (9)$$

можно найти дискретный набор решений (электронных состояний) $\{\lambda_{mn}, \Phi_{mn}\}$, $m=0,1,2,\dots$, причем $\{\lambda_{nn}, \Phi_{nn}\} = \{\lambda_n, \Phi_n\}$, $n=0,1,2,\dots$ (самосогласованные состояния полярона).

Знание этих состояний $\{\lambda_{mn}, \Phi_{mn}\}$ нужно для изучения явления фотовозбуждения и определения времени жизни возбужденных состояний (оптические переходы). При поглощении света электрон переходит сначала между разрешенными состояниями $\{\lambda_{mn}, \Phi_{mn}\}$ при фиксированном значении n (принцип Франка - Кондона^{/4/}), затем в результате безызлучательных процессов (т.е. с испусканием фононов) электрон релаксирует в состояния с другим n .

Одним из возможных способов решения задачи (4)-(5)

является метод последовательных приближений. Задавшись некоторым набором электронных волновых функций $\{\lambda_{mn}^{(0)}, \Phi_{mn}^{(0)}\}$ (начальное приближение), вычисляем матрицу эффективных потенциалов $V(x, \Phi_{mn}^{(0)})$. Далее, решая задачу (8)-(9), найдем новые функции $\{\lambda_{mn}^{(1)}, \Phi_{mn}^{(1)}\}$, которые, в свою очередь, используются для определения эффективного потенциала $V(x, \Phi_{mn}^{(1)})$. Этот процесс продолжается до самосогласования, т.е. до тех пор, пока собственные значения и волновые функции $\{\lambda_{mn}^{(k)}, \Phi_{mn}^{(k)}\}$, получаемые после двух последовательных итераций, не будут совпадать друг с другом, вернее, пока различие между ними не станет меньше наперед заданной точности решения. В данной работе реализован именно такой подход к решению задачи (4)-(5).

В работе^{/5/} описан пакет программ SNIDE для решения задач на собственные значения для интегродифференциального уравнения, созданный на основе модификации непрерывного аналога метода Ньютона с использованием кубических сплайнов. При вычислении решений задачи (4)-(5) с помощью этого пакета остро встал вопрос о подготовке хороших начальных приближений $\{\lambda_n^0, \Phi_n^0\}$ к узловым ($n>0$) решениям, так как происходило "скатывание" к безузловому решению от достаточно произвольно выбранного начального приближения. Предложенный в данной работе метод может быть использован также для реализации этой проблемы.

1. ИТЕРАЦИОННАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ (4)-(5)

Суть метода заключается в последовательном нахождении решений линейной задачи (8)-(9)

$$\{\lambda_{m0}, \Phi_{m0}\} \Rightarrow \{\lambda_{m1}, \Phi_{m1}\} \Rightarrow \dots \Rightarrow \{\lambda_{mn}, \Phi_{mn}\} \Rightarrow \dots,$$

$m=0,1,2,\dots$, причем на каждом шаге используются результаты с предыдущего шага.

Реализация метода возможна несколькими способами на каждом шаге.

Первый шаг. Нахождение $\{\lambda_{m0}, \Phi_{m0}\}$, $m=0, 1, 2, \dots$

1а) В качестве начального приближения к безузловому решению $(\lambda_{00}^0, \Phi_{00}^0)$ используется функция $\Phi_{00}^0(x) = \text{sche}^{-0.6x}$, $x \in [0, 60]$, нормированная по условию (9) и удовлетворяющая граничным условиям с заданной точностью, и собственное значение $\lambda_{00}^0 = V(0, \Phi_{00}^0(x))$.

1б) Используя начальное приближение $(\lambda_{00}^0, \Phi_{00}^0)$, вычисляем потенциал $V(x, \Phi_{00}^0)$ и многократно повторяем процесс решения задачи (8)–(9), реализованный в пакете SLIP4^{/6/}, т.е. для $k=1, 2, 3, \dots$ находим новое решение $(\lambda_{00}^k, \Phi_{00}^k)$, новый потенциал $V(x, \Phi_{00}^k)$ и т.д.

Процесс продолжается до стабилизации решения, т.е. до тех пор, пока норма $\|z_{00}^k - z_{00}^{k+1}\|_c$ не станет меньше заданной малой величины $\epsilon > 0$, т.е. до выполнения условий

$$|\lambda_{00}^k - \lambda_{00}^{k+1}| < \epsilon, \quad \max_{0 < x < \infty} |\Phi_{00}^k - \Phi_{00}^{k+1}| < \epsilon. \quad (1.1)$$

1с) С помощью программного пакета SNIDE^{/5/} решаем задачу (4)–(7) с начальным приближением $(\lambda_{00}^k, \Phi_{00}^k)$ и находим решение $(\lambda_{00}, \Phi_{00})$.

1д) Используя потенциал $V(x, \Phi_{00})$, можно найти семейство решений

$$\{\lambda_{m0}, \Phi_{m0}\}, \quad m=1, 2, \dots \quad (1.2)$$

Второй шаг

В качестве начального приближения на втором шаге можно взять решение $(\lambda_{10}, \Phi_{10})$ с одним узлом из семейства (1.2) найденных на первом шаге решений и перейти к действиям, аналогичным описанным выше для первого шага до стабилизации процесса по одноузловому решению (λ_1, Φ_1) . В результате выполнения второго шага мы получим семейство решений

$$\{\lambda_{m1}, \Phi_{m1}\}, \quad m=0, 1, 2, \dots, \quad (1.3)$$

где $(\lambda_{11}, \Phi_{11}) = (\lambda_1, \Phi_1)$.

После выполнения n шагов мы получаем матрицу собственных значений и матрицу собственных функций

$$\begin{bmatrix} \lambda_{00} & \lambda_{01} & \dots & \lambda_{0n} \\ \lambda_{10} & \lambda_{11} & \dots & \lambda_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \lambda_{m0} & \lambda_{m1} & \dots & \lambda_{mn} \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} \Phi_{00} & \Phi_{01} & \dots & \Phi_{0n} \\ \Phi_{10} & \Phi_{11} & \dots & \Phi_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Phi_{m0} & \Phi_{m1} & \dots & \Phi_{mn} \end{bmatrix}; \quad (1.4)$$

причем по главным диагоналям матриц расположены $\{\lambda_{nn}, \Phi_{nn}\} = \{\lambda_n, \Phi_n\}$, которые являются решениями задачи (4)–(5).

2. АНАЛИЗ ЧИСЛЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

При вычислении матриц (1.4) многократно решалась линейная задача (8)–(9) с использованием пакета программ SLIP4, для успешной работы которого также необходимы начальные приближения к решениям.

Так как любое начальное приближение Φ_{mn}^0 должно удовлетворять условию нормировки (5), то эффективный потенциал $V(x, \Phi_{mn}^0(x))$ имеет следующее асимптотическое поведение:

$$V(x, \Phi_{mn}^0(x)) \xrightarrow{x \rightarrow 0} V_{mn}^0,$$

$$V(x, \Phi_{mn}^0(x)) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 1/4x,$$

$$\text{где } V_{mn}^0 = \int_0^{\infty} ((\Phi_{mn}^0(x))^2 / x) dx.$$

Таким образом, эффективный потенциал V при малых x ограничен величиной V_{mn}^0 , а при больших x ведет себя как кулоновский потенциал (см. рис. 1).

Отсюда следует, что собственные значения λ_{mn} всегда ограничены, $|\lambda_{mn}| < V_{mn}^0$, а решения напоминают кулоновские функции.

В таблице приведены результаты вычислений λ_{mn} по описанным алгоритмам для одного варианта поляронной задачи ($A=71.086$, $c=0.881$, $a=\alpha=2.$, $\mu=0.458$), выбранного в

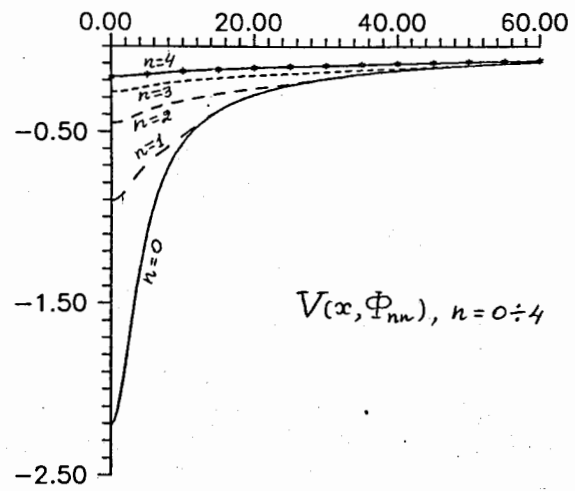


Рис. 1

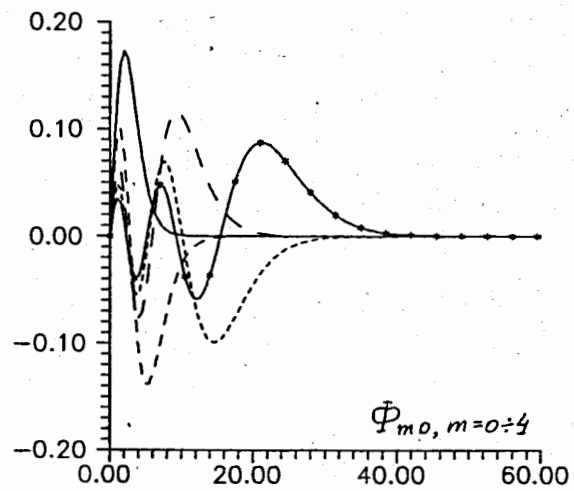


Рис. 2

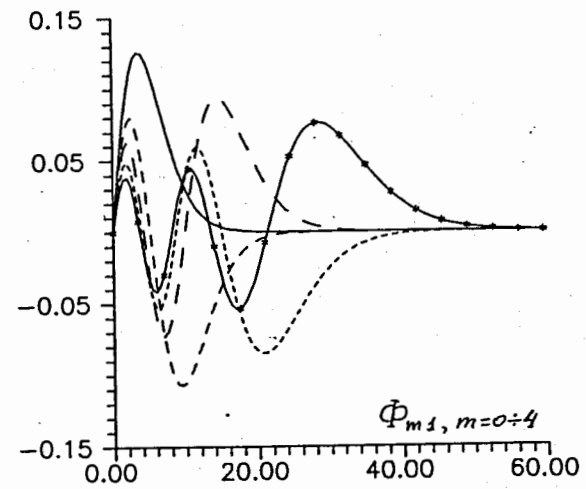


Рис. 3

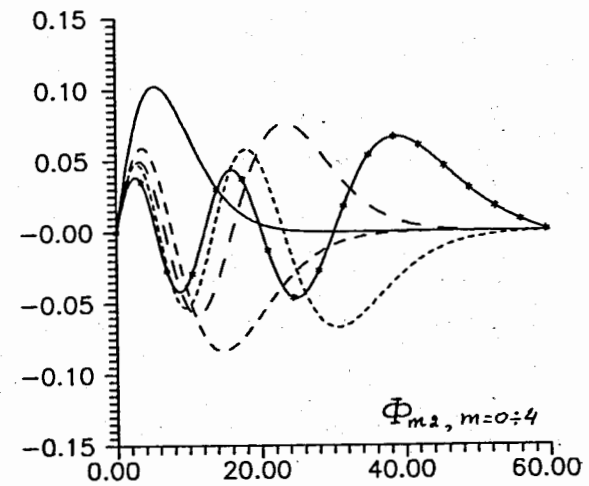


Рис. 4

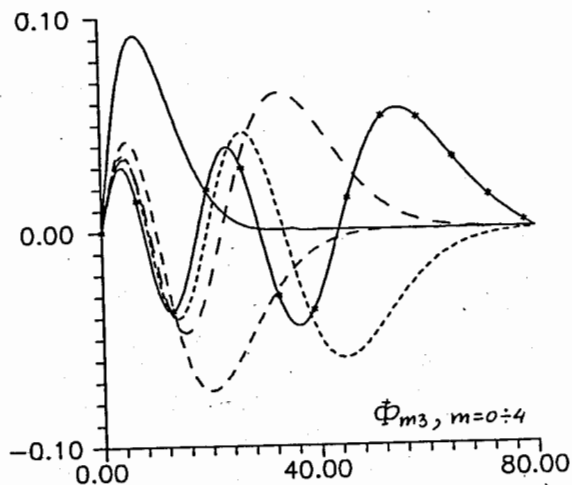


Рис.5

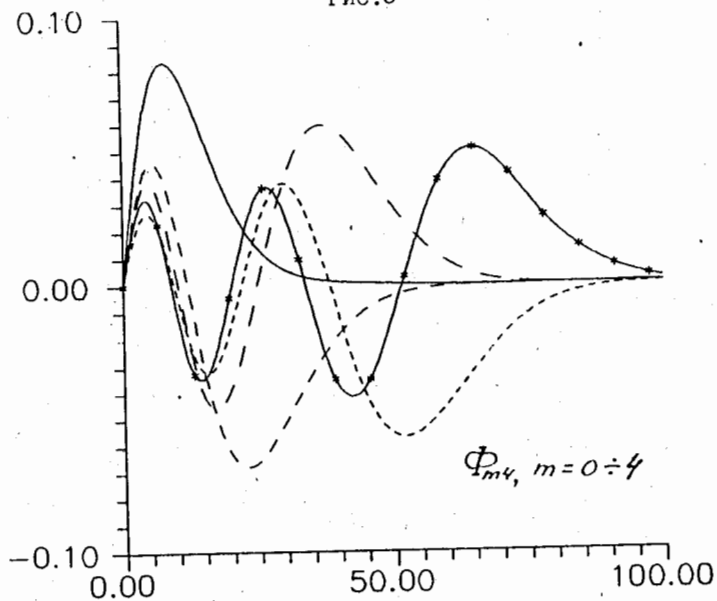


Рис.6

соответствии с имеющимся двухузловым решением задачи (1)-(2)^{13/}. Для каждого $n=0,1,2,3,4$ в первом столбце представлено собственное значение, полученное после стабилизации (1.b), а во втором столбце - собственное значение из семейства (1.2).

На первом шаге при получении семейства (1.2) в качестве начального приближения использовались функции

$$\Phi_{10}^0(x) = x(x-x_1)e^{-0.6x},$$

$$\Phi_{20}^0(x) = x(x-x_1)(x-x_2)e^{-0.6x}$$

и т.д.

На каждом из рис.2,3,4,5,6 представлено по пять решений $\Phi_{mn}(x)$ задачи (4)-(7) с числом узлов $n=0,1,2,3,4$, полученных соответственно для потенциалов $V(x, \Phi_{00})$, $V(x, \Phi_{11})$, $V(x, \Phi_{22})$, $V(x, \Phi_{33})$, $V(x, \Phi_{44})$.

Задача решалась на интервале $x \in [0, 60]$ для $n=0,1,2$, на интервале $x \in [0, 80]$ для $n=3$ и на интервале $x \in [0, 100]$ для $n=4$ с шагом $h=0.05$. Самосогласование в смысле выполнения условия (1.1) наступало после 3-8 итераций для $\epsilon=10^{-2}-10^{-3}$. Для уточнения самосогласованных состояний при величине невязки $\delta < 10^{-4}$ требовалось в среднем 10-15 итераций.

ТАБЛИЦА

M	n=0		n=1		n=2		n=3		n=4	
0	1.414	1.418	.711	.636	.381	.328	.242	.187	.166	.149
1	.777	.780	.491	.444	.290	.251	.191	.150	.137	.118
2	.464	.465	.333	.312	.224	.194 ^{13/}	.157	.126	.117	.099
3	.304	.304	.234	.223	.171	.154	.127	.107	.102	.086
4	.213	.213	.173	.167	.134	.122	.102	.089	.085	.068
5	.157	.158	.133	.128	.105	.095	.075	.073	.065	.063
V_n	2.22		0.91		0.45		0.27		0.18	

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный метод может оказаться полезным и при решении многомерных задач для полярона, сводящихся к решению систем интегродифференциальных уравнений. Для этого изложенный в данной работе итерационный процесс надо распространить на решение систем линейных дифференциальных уравнений.

Авторы искренне благодарны профессору Пузынину И.В. за научное руководство и создание творческой атмосферы при решении данной задачи, а также Коробову В.И., Смирнову Ю.С. и Стриж Т.А. за помощь в работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Возбужденные поляронные состояния в конденсированных средах. Сборник научных трудов. Пущино. НЦБИ АН СССР, 1990.
2. Luttinger J.M., Lu C.Y. Phys. Rev. B, 1980, V21, №10, p.4251-4263.
3. Амирханов И.В. и др. ОИЯИ, P11-85-445, Дубна, 1985.
4. Давыдов А.С. Квантовая механика. Наука. М. 1973.
5. Амирханов И.В., Земляная Е.В., Пузынина Т.П. ОИЯИ, P11-91-87, Дубна, 1991.
6. Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Стриж Т.А., ОИЯИ, P11-87-332, Дубна, 1987.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 марта 1991 года.

Амирханов И.В., Земляная Е.В., Пузынина Т.П.
Итерационный метод решения уравнения полярона
в сферически симметричном случае

P11-91-139

Предложен итерационный метод численного исследования возбужденных состояний полярона в сферически симметричном случае, сводящий решение нелинейной задачи на собственные значения для интегродифференциального уравнения (модель Латтинжера — Лу) к последовательному решению линейных дифференциальных задач на собственные значения. Вычислительный процесс реализован на основе программных пакетов SLIPH4 и SNIDE. Приводится описание алгоритма и характеристики первых пяти состояний полярона, вычисленные этим методом.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1991

Перевод Е.И.Хижняк

Amirkhanov I.V., Zemlyanaya E.V., Puzynina T.P.
Iteration Method for Solving the Spherically Symmetric
Polaron Equation

P11-91-139

An iteration method for numerical investigation of the spherically symmetric polaron excited states is proposed, such that reduces the solving of the non-linear eigenvalue problem for the integrodifferential equation (the Lattinger — Lu model) to the sequential solving of linear eigenvalue problems for differential equations. The computing process is realized on the basis of program complex SLIPH4 and SNIDE. An algorithm and parameters of the first five polaron states calculated by this method are given.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1991