

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

И 265

P4-87-878

В.К.Игнатович

НОВЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ
ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Направлено в журнал
"Теоретическая и математическая физика"

1987

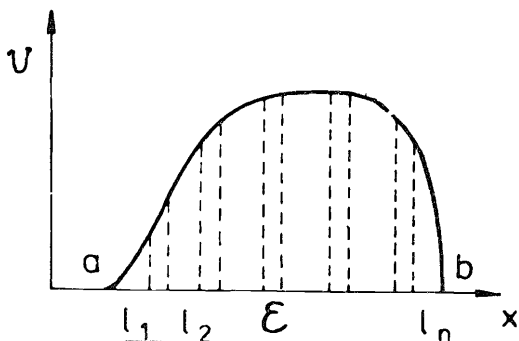
1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно, решить аналитически уравнение Шредингера в случае произвольного потенциала не удается. Приходится прибегать к численному решению, для чего разработано множество методов. Одним из них является метод фазовых функций (см., например, ^{1/}), в котором уравнение Шредингера приводится к нелинейному дифференциальному уравнению первого порядка для фазовой функции. В настоящей работе предлагается метод близкий, но и несколько отличающийся от него. Новый подход основывается на рекуррентных соотношениях, применявшихся для решения задач, связанных с периодическим потенциалом ^{2/}. Этот подход оказался чрезвычайно плодотворным и имеющим широкое применение не только для решения уравнения Шредингера, но и для решения широкого класса линейных дифференциальных уравнений второго порядка (см., например, ^{3/}).

2. АМПЛИТУДЫ ОТРАЖЕНИЯ И ПРОПУСКАНИЯ ОДНОМЕРНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Для иллюстрации метода рассмотрим задачу рассеяния на одномерном потенциале $U(x)$, отличным от нуля внутри конечного отрезка $a \leq x \leq b$. Сначала найдем амплитуды отражения \bar{R} справа и \bar{R} слева и амплитуду пропускания $\bar{T} = T = T$ (потенциал может быть несимметричным), а затем — волновую функцию внутри потенциала.

Разобьем отрезок $[a, b]$ на небольшие, но конечные интервалы длиной l_j , между которыми введем бесконечно узкие щели с нулевым потенциалом (см. рисунок). Внутри каждого интервала аппроксимируем потенциал тем или иным способом, но так, чтобы при данной аппроксимации можно было бы внутри интервала l_j записать аналитическое решение для волновой функции. Тогда для отдельно



взятой потенциальной ступеньки шириной l_j можно найти амплитуды отражения слева \vec{r}_j и справа \vec{r}_j и пропускания $\vec{t}_j = \vec{t}_j = t_j$. Согласно /3/ эти амплитуды равны

$$\vec{r} = r_1^+ + t_1^+ t_1^- r_2^+ e_{12} e_{21} / (1 - r_1^- r_2^+ e_{12} e_{21}), \quad (1)$$

$$t = t_1^+ t_2^+ e_{12} / (1 - r_1^- r_2^+ e_{12} e_{21}),$$

где r_k^+ и r_k^- ($k = 1, 2$) — амплитуды отражения k -й границы потенциальной ступеньки слева и справа соответственно, t_k^+ — аналогичные амплитуды пропускания, а e_{12} и e_{21} — функции распространения внутри потенциальной ступеньки от левой границы до правой и наоборот, соответственно. Если внутри j -го интервала потенциал аппроксимируется постоянной величиной u_j , то

$$e_{12} = e_{21} = \exp(ik_j l_j), \quad k_j = (k^2 - u_j)^{1/2}, \quad r_1^+ = r_2^- = \pm(k - k_j) / (k_j + k),$$

$$t_1^+ = 2k / (k_j + k), \quad t_1^- = t_2^+ = 2k_j / (k_j + k),$$

k^2 — кинетическая энергия частицы в вакууме, причем величина $\hbar^2/2m$, где m — масса частицы, принята равной единице. При линейной аппроксимации потенциала используются функции Эйри /4/, а при квадратичной — функции параболического цилиндра или полиномы Эрмита.

Для расчета \vec{R} и T воспользуемся рекуррентными соотношениями /2/, в соответствии с которыми

$$\vec{R} = \vec{r}_1 + t_1^2 \vec{R}_1 / (1 - \vec{r}_1 \vec{R}_2), \quad T = t_1 T_1 / (1 - \vec{r}_1 \vec{R}_1), \quad (2)$$

где \vec{r}_1 и T_1 — амплитуды отражения и пропускания всего потенциала за вычетом интервала l_1 . Повторяя эти соотношения столько раз, на сколько интервалов разбит отрезок $[a, b]$, и полагая, что последние $\vec{R}_n = 0$ и $T_n = 1$, получаем искомые величины \vec{R} и T .

Выражение для \vec{R} можно представить в виде цепной дроби:

$$\vec{R} = \vec{r}_1 + \frac{t_1^2}{-\vec{r}_1 + \frac{1}{\vec{r}_2 + \frac{t_2^2}{-\vec{r}_2 + \frac{1}{\vec{r}_3 + \dots}}}} \quad (2a)$$

Для оценки точности расчета необходимо выполнить еще одно вычисление, разбив каждую область на две части. Если амплитуды отражения и пропускания потенциалов левой и правой частей области i обо-

значить через \vec{r}_{i1} , t_{i1} и \vec{r}_{i2} , t_{i2} соответственно, то в качестве

\vec{r}_i и t_i в выражение (2a) следует подставить

$$\vec{r}_i = \vec{r}_{i1} + t_{i2}^2 \vec{r}_{i2} / (1 - \vec{r}_{i1} \vec{r}_{i2}), \quad t_i = t_{i1} t_{i2} / (1 - \vec{r}_{i1} \vec{r}_{i2}),$$

$$\vec{r}_i = \vec{r}_{i2} + t_{i2}^2 \vec{r}_{i1} / (1 - \vec{r}_{i1} \vec{r}_{i2}).$$

3. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ

Полная волновая функция вне потенциала может быть записана в виде

$$\psi = \theta(x \leq a) \{ \exp[ik(x - a)] + \vec{R} \exp[-ik(x - a)] \} + \theta(x \geq b) T \exp[ik(x - b)],$$

где θ — функция равна единице, когда условие, записанное в ее аргументе, выполнено, и нулю в противном случае. Внутри интервала l_j волновую функцию легко рассчитать, исходя из следующих соображений: если на отдельно взятый потенциал U_j слева падает волна единичной амплитуды, то внутри потенциала возникает волновая функция

$$\vec{\psi} = t_1^+ (\vec{e}_1 + e_{12} t_2^+ \vec{e}_2) / (1 - r_1^- r_2^+), \quad (3)$$

где \vec{e}_1 и \vec{e}_2 — функции распространения, описывающие волны, идущие от левой и, соответственно, правой границы потенциала. При постоянном U_j имеем

$$\vec{e}_1 = \exp[ik_j(x - x_1)], \quad \vec{e}_2 = \exp[-ik_j(x - x_2)],$$

где x_1 , x_2 — левый и правый края потенциала U_j . Если на этот потенциал падает волна справа с единичной амплитудой, то внутри потенциала возникает аналогичная волновая функция $\vec{\psi}$. Если же амплитуда волны, падающей слева, равна \vec{A} , а справа, \vec{A} , то полная волновая функция внутри потенциала U_j равна $A_j \psi_j + \vec{A}_j \psi_j$. Нетрудно подсчитать амплитуды A и \vec{A} в случае, когда интервал l_j находится внутри отрезка $[a, b]$:

$$\vec{A} = T_{-j} / (1 - \vec{r}_{-j} \vec{R}_{j-1}), \quad \vec{A} = T_{-(j+1)} \vec{R}_j / (1 - \vec{r}_{-(j+1)} \vec{R}_j), \quad (4)$$

где \vec{R}_{-k} и T_{-k} — амплитуды отражения и пропускания части потенциала, расположенной левее интервала l_k , а \vec{R}_k и T_k относятся к той части потенциала, которая расположена правее интервала l_k .

4. СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ

При расчете связанных состояний нужно вычислить \rightarrow отражение от части потенциала, расположенной правее минимума, — R и от части потенциала, расположенной левее минимума, — \bar{R} . Поскольку в этом случае $R = \exp(i\phi)$, то связанное состояние определяется из условия $\bar{\phi} + \phi = 2\pi n$, что представляет собой хорошо известное правило квантования.

5. ТРЕХМЕРНЫЙ СФЕРИЧЕСКИ-СИММЕТРИЧНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

Все вышесказанное применимо и к трехмерным сферически-симметричным потенциалам. Отличие состоит только в том, что функции распространения имеют другой вид. Например, в случае ступенчатой аппроксимации потенциала функции распространения будут не экспонентами, а сферическими функциями Бесселя и Ханкеля (см., например, ^{3, 4}).

Если ширину интервала ℓ_j устремить к нулю, то рекуррентные соотношения сведутся к дифференциальному уравнению первого порядка, аналогичному уравнению Риккати в методе фазовой функции (см., например, ¹).

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предлагаемый метод хорош тем, что он устойчив, поскольку позволяет представить решение в виде цепной дроби для амплитуды отражения. В амплитуде пропускания, куда входит произведение амплитуд пропускания отдельных потенциалов, ошибки округления накапливаются медленно, поскольку они независимы для соседних областей. Кроме того, поскольку при квадратичной аппроксимации потенциала можно использовать небольшое число разбиений, то метод может оказаться экономным во времени. Еще одно его достоинство состоит в том, что он позволяет качественно предугадывать результаты до проведения численных расчетов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бабиков В.В. Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1976.
2. Игнатович В.К. — УФН, 1986, т.150, вып.1, с. 145-158.
3. Игнатович В.К. — Препринт ОИЯИ Р4-87-402, Дубна, 1987.
4. Churchill J.N. — Amer. J. Phys., 1987, v.55, p.372.

Рукопись поступила в издательский отдел
15 декабря 1987 года.

Игнатович В.К.

P4-87-878

Новый метод решения одномерного уравнения Шредингера

Потенциал в уравнении Шредингера разделяется бесконечно узкими щелями на отдельные независимые потенциальные барьеры, вершины которых аппроксимируются квадратным полиномом. Для каждого барьера находится полная волновая функция внутри барьера, а также амплитуды отражения и пропускания. После чего методом рекуррентных соотношений строится амплитуда отражения от полного потенциала, которая выражается через амплитуды отдельных потенциальных барьеров в виде цепной дроби. Аналогично находится амплитуда пропускания полного потенциала и волновая функция в любой заданной области этого потенциала.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод автора

Ignatovich V.K.

P4-87-878

A New Method to Solve the One-Dimensional Schrödinger Equation

The potential in the Schrödinger equation is divided by infinitesimal narrow gaps on separate potential barriers. The tops of these barriers are approximated by the second order polynomials. The inside wave function and reflection and transmission amplitudes are obtained for every barrier separately. After that the recursive relations are used to present the reflection amplitude for the total potential in the chain fraction form in terms of partial barrier amplitudes. The transmission amplitude and the wave function at any point inside the potential are constructed in the same way.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987