объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р4-93-150

С.И.Виницкий, Е.В.Инопин *, Н.А.Чеканов*

РЕШЕНИЕ ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В САМОСОГЛАСОВАННОМ БАЗИСЕ

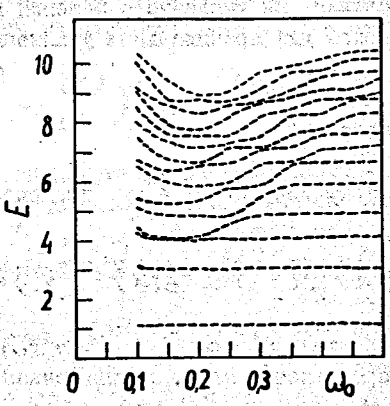
Направлено в Оргкомитет Международной конференции
"Laser Physics-93", июнь-июль 1993, Москва

*Харьковский физико-технический институт

1993

I. Введение

I. Аналитические выражения для энергетических спектров и волновых функций двумерного уравнения Шредингера удается получить крайне редко, поэтому для нахождения этих квантовых характеристик используются численные методы. Одним из эффективных и хорошо разработанных методов решения уравнения Шредингера является метод диагонализации или обратной итерации подпространств/I,2/. Однако эффективность метода диагонализации снижается в энергетическом диапазоне, где в классическом пределе движение хаотическое. Если вычислять спектры многомерных гамильтоновых систем, поверхности потенциальной энергии (ППЭ) которых имеют несколько локальных минимумов (коллективные квадрупольные поверхностные колебания атомных ядер/3,4/), то точность численных расчетов энергетических уровней резко ухудшается. Например, для гамильтониана квадрупольных поверхностных колебаний с одним минимумом на ППЭ при диагонализации соответствующей матрицы размером 800x800 приблизительно I/3÷I/4 часть уровней имеют точность несколько процентов от среднего расстояния между соседними уровнями/5,6/. При диагонализации таких же размеров матрицы, но при значениях параметров гамильтониана, допускающих наличие четырех локальных минимумов на ППЭ, приблизительно такую же точность имеют лишь первые IO–I5 уровней. Причем в последнем случае указанная точность достигается благодаря тщательному подбору варьируемой частоты ω базиса, оптимальное значение которой различно для различных уровней (см. рис.). Точность расчета волновых функций, как правило, хуже.



Исследование двумерных гамильтоновых систем, ППЭ которых имеют несколько локальных минимумов (см., например,[3,4]), представляет большой интерес. Известно[7,3], что для многих систем такого типа существуют смешанные состояния, когда при одной и той же энергии в разных минимумах ППЭ реализуются различные классические режимы движения. Изучение свойств энергетического спектра и волновых функций таких смешанных состояний позволяет углубить понимание квантовых проявлений классического хаоса и явления квазипересечений энергетических уровней[8].

Представляет интерес также исследование влияния хаотических режимов движения на процесс туннелирования между локальными минимумами, в которых характер классического движения может быть как случайным, так и регулярным[9,10].

В настоящей работе предлагается альтернативный способ решения стационарного двумерного уравнения Шредингера, приводящий его к бесконечной линейной системе обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) одной переменной. Такой подход представляется более перспективным, чем диагонализация, в силу того, что по одной переменной проводится точное (численное) интегрирование, а редукция осуществляется только по другой переменной, т.е. бесконечная линейная система ОДУ заменяется конечной. При дальнейшей дискретизации обыкновенных дифференциальных уравнений методом конечных разностей предложенный подход можно сравнивать с методом диагонализации, но со специальным подбором базисных функций, согласованных с видом потенциалов данной задачи, который позволяет существенно повысить скорость сходимости разложений искомых решений.

В данной работе реализация предлагаемого метода решения двумерного уравнения Шредингера проводится для C_{3v} инвариантного гамильтониана. В этом случае для численного решения полученных краевых задач для трех систем дифференциальных уравнений рассмотрены численные схемы.

2. Основные уравнения

В декартовой системе координат C_{3v} инвариантный гамильтониан выберем в виде

$$H=-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)+\frac{1}{2}(x^2+y^2)+b\left(x^2y-\frac{1}{3}y^3\right)+c(x^2+y^2)^2. \quad (I)$$

В полярных координатах $x=r\cos\varphi$, $y=r\sin\varphi$, в которых C_{3v} инвариантность проявляется явно, гамильтониан (I) принимает следующую форму

$$H=-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+\frac{r^2}{2}+\frac{br^3}{3}\cos 3\varphi+cr^4. \quad (2)$$

Стационарное уравнение Шредингера $H\psi=E\psi$ при замене

$$\psi(r,\varphi)=\frac{u(r,\varphi)}{r}, \quad (3)$$

которая приводит к исчезновению первой производной по радиальной переменной, в полярных координатах можно переписать в виде

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)u+2\left[E-\alpha(r)-\beta(r)\sin 3\varphi\right]u=0, \quad (4)$$

где введены обозначения

$$\alpha(r)=\frac{r^2}{2}+cr^4-\frac{1}{8r^2}, \quad (5а)$$

$$\beta(r)=\frac{br^3}{3}. \quad (5б)$$

Свойства симметрии гамильтониана (I) подсказывают, что решение уравнения Шредингера (4) надо искать в виде следующего разложения:

$$u(r,\varphi)=\sum_{L\geq 0}u_L^{(j)}(r)\,e_L^{(j)}(\varphi),\quad j=\pm 1, \quad (6)$$

где функции $e_L^{(j)}(\varphi)$ определены как

$$e_L^{(j)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Phi_L+j(-1)^L\Phi_{-L}\right], \quad (7а)$$

$$\Phi_L=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(-iL\varphi),\quad L\geq 0. \quad (7б)$$

Легко показать, что функции $e_L^{(j)}$ составляют полный базис по угловой переменной на отрезке $[0,2\pi]$ с условием нормировки

$$\left(e_L^{(j)},e_{L'}^{(j')}\right)=2^{\delta_{L,0}}\delta_{jj'}\delta_{LL'} \quad (8)$$

и реализуют все три неприводимые представления дискретной группы C_{3v} [11]. (Круглые скобки обозначают скалярное произведение).

Поскольку $\Phi_{-L}=\Phi_L^*$ (звездочка обозначает комплексное сопряжение), то базисные функции $e_L^{(j)}$ имеют вид:

$$e_L^{(+)}=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos 2l\varphi, & \text{если } L=2l,\\ -\frac{2}{\sqrt{\pi}}\sin(2l+1)\varphi, & \text{если } L=2l+1,\ l=0,1\ldots\end{cases} \quad (9а)$$

$$e_L^{(-)} = \begin{cases} \frac{-i}{\sqrt{\pi}} \sin 2l\varphi, & \text{если } L = 2l, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(2l+1)\varphi, & \text{если } L = 2l+1,\ l = 0,1,2,3\ldots \end{cases} \qquad (9б)$$

Для дальнейшего разложения (6) запишем с явным учетом выражений (9)

$$u(r,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty}\left\{u_{2l}^{(+)}\cos 2l\varphi + u_{2l+1}^{(+)}\sin(2l+1)\varphi + u_{2l}^{(-)}\sin 2l\varphi + u_{2l+1}^{(-)}\cos(2l+1)\varphi\right\} \qquad (10)$$

Проектируя функцию $u(r,\varphi)$ на базисные функции (7) и принимая во внимание условия нормировки (8) и соотношения

$$\frac{\partial^2 e_L^{(j)}}{\partial \varphi^2} = -L^2 e_L^{(j)}, \qquad (11а)$$

$$\left(e_{L'}^{(j')}, \sin 3\varphi \, e_L^{(j)}\right) = \frac{-i}{2}\delta_{jj'}\left[\delta_{L'-L,-3} - \delta_{L'-L,3} - j(-1)^L\delta_{L+L',3}\right], \qquad (11б)$$

получаем следующие четыре бесконечные линейные системы ОДУ

$$\begin{aligned}
&\hat{D}_0[u_0^{(+)}] - \beta u_3^{(+)} = 0\\
&\hat{D}_3[u_3^{(+)}] + \beta[u_6^{(+)} - u_0^{(+)}] = 0\\
&\hat{D}_6[u_6^{(+)}] - \beta[u_9^{(+)} - u_3^{(+)}] = 0\\
&\hat{D}_9[u_9^{(+)}] + \beta[u_{12}^{(+)} - u_6^{(+)}] = 0\\
&\hat{D}_{12}[u_{12}^{(+)}] - \beta[u_{15}^{(+)} - u_9^{(+)}] = 0\\
&\ldots\ldots\ldots
\end{aligned} \qquad (12)$$

$$\begin{aligned}
&\hat{D}_3[u_3^{(-)}] - \beta u_6^{(-)} = 0\\
&\hat{D}_6[u_6^{(-)}] + \beta[u_9^{(-)} - u_3^{(-)}] = 0\\
&\hat{D}_9[u_9^{(-)}] - \beta[u_{12}^{(-)} - u_6^{(-)}] = 0\\
&\hat{D}_{12}[u_{12}^{(-)}] + \beta[u_{15}^{(-)} - u_9^{(-)}] = 0\\
&\ldots\ldots\ldots
\end{aligned} \qquad (13)$$

$$\begin{aligned}
&\hat{D}_1[u_1^{(+)}] + \beta[u_4^{(+)} - u_2^{(+)}] = 0\\
&\hat{D}_2[u_2^{(+)}] - \beta[u_5^{(+)} + u_1^{(+)}] = 0\\
&\hat{D}_4[u_4^{(+)}] - \beta[u_7^{(+)} - u_1^{(+)}] = 0\\
&\hat{D}_5[u_5^{(+)}] + \beta[u_8^{(+)} - u_2^{(+)}] = 0\\
&\hat{D}_7[u_7^{(+)}] + \beta[u_{10}^{(+)} - u_4^{(+)}] = 0\\
&\ldots\ldots\ldots
\end{aligned} \qquad (14)$$

$$\begin{aligned}
&\hat{D}_1[u_1^{(-)}] - \beta[u_4^{(-)} + u_2^{(-)}] = 0\\
&\hat{D}_2[u_2^{(-)}] + \beta[u_5^{(-)} - u_1^{(-)}] = 0\\
&\hat{D}_4[u_4^{(-)}] + \beta[u_7^{(-)} - u_1^{(-)}] = 0\\
&\hat{D}_5[u_5^{(-)}] - \beta[u_8^{(-)} - u_2^{(-)}] = 0\\
&\hat{D}_7[u_7] - \beta[u_{10}^{(-)} - u_4^{(-)}] = 0\\
&\ldots\ldots\ldots
\end{aligned} \qquad (15)$$

Здесь дифференциальный оператор, входящий в системы (12)-(15), определен как

$$\hat{D}_l = \frac{d^2}{dr^2} + 2\left[E - V_L(r)\right], \qquad (16а)$$

$$V_L(r) = \frac{L^2}{2r^2} + \alpha(r), \tag{16б}$$

а величина $\alpha(r)$ задана выражением (5а).

Полученные системы (12)-(15), состоящие из бесконечного числа ОДУ радиальной переменной, в матричном представлении для операторов

$$A_1 = \begin{pmatrix} \hat{D}_0 & -\beta & 0 & 0 & 0 & \dots \\ -\beta & \hat{D}_3 & \beta & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \beta & \hat{D}_6 & -\beta & 0 & \dots \\ 0 & 0 & -\beta & \hat{D}_9 & \beta & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \tag{17}$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} \hat{D}_3 & -\beta & 0 & 0 & 0 & \dots \\ -\beta & \hat{D}_6 & \beta & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \beta & \hat{D}_9 & -\beta & 0 & \dots \\ 0 & 0 & -\beta & \hat{D}_{12} & \beta & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \tag{18}$$

$$E^{(+)} = \begin{pmatrix} \hat{D}_1 & -\beta & \beta & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ -\beta & \hat{D}_2 & 0 & -\beta & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \beta & 0 & \hat{D}_4 & 0 & -\beta & 0 & 0 & \dots \\ 0 & -\beta & 0 & \hat{D}_5 & 0 & \beta & 0 & \dots \\ 0 & 0 & -\beta & 0 & \hat{D}_7 & 0 & \beta & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \tag{19а}$$

$$E^{(-)} = \begin{pmatrix} \hat{D}_1 & -\beta & -\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ -\beta & \hat{D}_2 & 0 & \beta & 0 & 0 & 0 & \dots \\ -\beta & 0 & \hat{D}_4 & 0 & \beta & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \beta & 0 & \hat{D}_5 & 0 & \beta & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \beta & 0 & \hat{D}_7 & 0 & -\beta & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \tag{19б}$$

и собственных векторов

$$\begin{aligned} u_1 &= \mathrm{Col}\{u_0^{(+)}, u_3^{(+)}, u_6^{(+)}, \dots\}, \\ u_2 &= \mathrm{Col}\{u_3^{(-)}, u_6^{(-)}, u_9^{(-)}, \dots\}, \\ u^{(+)} &= \mathrm{Col}\{u_1^{(+)}, u_2^{(+)}, u_4^{(+)}, u_5^{(+)}, \dots\}, \\ u^{(-)} &= \mathrm{Col}\{u_1^{(-)}, u_2^{(-)}, u_4^{(-)}, u_5^{(-)}, \dots\} \end{aligned} \tag{20}$$

принимают вид

$$\begin{aligned} A_1 u_1 &= 0, \\ A_2 u_2 &= 0, \\ E^{(+)} u^{(+)} &= 0, \\ E^{(-)} u^{(-)} &= 0. \end{aligned} \tag{21}$$

Решая задачу на собственные значения для уравнений (21) при заданных граничных условиях первого рода в начале координат и на бесконечности, для собственных векторов (20) можно получить три независимые последовательности энергетических уровней и соответствующие волновые функции, которые принято обозначать буквами A_1, A_2 и E. Напомним, что состояния E-типа двукратно вырождены, поэтому существует унитарная матрица V такая, что $V^{-1}E^{(-)}V = E^{(+)}$, и это приводит к одному и тому же спектру для матриц (19а) и (19б).

3. Дискретизация уравнений

3.1. Метод диагонализации

Рассмотрим две численные схемы решения полученных уравнений (21).

Прямой путь решения сингулярной задачи (21) состоит в переходе к регулярной задаче и замене дифференциального оператора (16а) конечными разностями на конечном отрезке $[0, R]$. В результате с учетом граничных условий бесконечную систему (21) можно свести к алгебраической задаче на собственные значения. Дифференциальный оператор (16а) аппроксимируем конечными разностями с помощью формулы Нумерова /12/ (поскольку первая производная по независимой переменной отсутствует). Тогда, например, уравнения (14) для состояний Е-типа приводятся к следующей линейной алгебраической системе

$$(\mathcal{A} - \lambda \mathcal{B})\mathcal{X} = 0. \tag{22}$$

Матрицы, входящие в выражение (22), определяются следующим образом

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} A_1 & C & -C & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & - \\ C & A_2 & 0 & C & 0 & 0 & 0 & 0 & - \\ -C & 0 & A_4 & 0 & C & 0 & 0 & 0 & - \\ 0 & C & 0 & A_5 & 0 & -C & 0 & 0 & - \\ 0 & 0 & C & 0 & A_7 & 0 & -C & 0 & - \\ 0 & 0 & 0 & -C & 0 & A_8 & 0 & C & - \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - \end{pmatrix}, \tag{23}$$

$$\mathcal{B} = \mathrm{diag}\,(B, B, B, \ldots),$$

где A, B и C обозначают матрицы размерностью $R \times R$ (R – число точек по радиальной переменной) и имеют вид

$$A = \begin{pmatrix} \xi_L(1) & \eta_L(2) & 0 & 0 & 0 & - \\ \eta_L(1) & \xi_L(2) & \eta_L(3) & 0 & 0 & - \\ 0 & \eta_L(2) & \xi_L(3) & \eta_L(4) & 0 & - \\ 0 & 0 & \eta_L(3) & \xi_L(4) & \eta_L(5) & - \end{pmatrix}. \tag{24}$$

Здесь функции $\xi_L(r)$ и $\eta_L(r)$ в n-й точке дискретной сетки с шагом h по радиальной переменной определяются через эффективный потенциал (16б)

$$\xi_L(n) = 2 + \frac{5h^2}{3} U_L(n), \quad \eta_L(n) = -1 + \frac{h^2}{6} U_L(n), \tag{25}$$

$$B = \begin{pmatrix} 10 & 1 & 0 & 0 & 0 & - \\ 1 & 10 & 1 & 0 & 0 & - \\ 0 & 1 & 10 & 1 & 0 & - \\ 0 & 0 & 1 & 10 & 1 & - \\ - & - & - & - & - & - \end{pmatrix} \tag{26}$$

$$C = \begin{pmatrix} 10\gamma(1) & \gamma(2) & 0 & 0 & - \\ \gamma(1) & 10\gamma(2) & \gamma(3) & 0 & - \\ 0 & \gamma(2) & 10\gamma(3) & \gamma(4) & - \\ - & - & - & - & - \end{pmatrix} \tag{27}$$

Столбец $\mathcal{X}$ из выражения (22), состоящий из M неизвестных функций (14), представим в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{X} = \mathrm{Col}\,\{ & u_1^{(+)}(1), u_1^{(+)}(2), u_1^{(+)}(3), \ldots, u_1^{(+)}(R), \\ & u_2^{(+)}(1), u_2^{(+)}(2), u_2^{(+)}(3), \ldots, u_2^{(+)}(R), \\ & u_4^{(+)}(1), u_4^{(+)}(2), u_4^{(+)}(3), \ldots, u_4^{(+)}(R), \\ & \ldots\ldots \} \end{aligned} \tag{28}$$

Поскольку матрицы $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}$ симметричные и матрица $\mathcal{B}$ дополнительно положительно определена, то собственные значения $\lambda = \frac{1}{6} h^2 E$ в уравнении (22) вещественны /1/.

Рассмотренный подход к численному решению исходных бесконечных систем ОДУ (12)-(15) требует суперкомпьютеров, хотя использование специальных программ для диагонализации сильно разреженных матриц типа (23)-(27) значительно уменьшает требуемые ресурсы /13/. Более перспективной может оказаться другая численная схема расчета систем типа (21).

3.2. Итерационный метод

Перепишем систему (12)-(15), состоящую из ОДУ второго порядка, как систему ОДУ первого порядка. Например, для состояний Е-типа будем иметь

$$\begin{aligned} \dot{y}_1 &= y_2 \\ \dot{y}_2 &= g_1 y_1 + \beta (y_5 - y_3) \end{aligned} \tag{29}$$

$$\dot{y}_3 = y_4$$
$$\dot{y}_4 = g_2 y_3 - \beta (y_7 - y_1)$$
$$\dot{y}_5 = y_6$$
$$\dot{y}_6 = g_4 y_5 - \beta (y_9 - y_1)$$
$$\dot{y}_7 = y_8$$
$$\dot{y}_8 = g_5 y_7 + \beta (y_{11} - y_3) \quad ,$$

где функция $g_l(r) = 2\,[U_l(r) - E]$, а точка означает дифференцирование по переменной r.

Введем вектор-столбец

$$y = \{y_1, y_2, y_3, \ldots, y_{2M}\} = \{u_1^{(+)}, u_1^{(+)}, u_2^{(+)}, u_2^{(+)}, \ldots\}, \quad (30)$$

и систему (29), ограничившись 2М уравнениями, запишем в редуцированном виде

$$\dot{y}_i = \sum_k e_{ik}(r) y_k \quad , (i, k = 1, 2, \ldots 2M), \quad (31)$$

где матричные элементы $e_{ik}(r)$ определяются из выражения (29).

Как известно из теории ОДУ первого порядка /14/, решение (31) можно представить в виде линейной комбинации

$$y_j = \sum_k C_k z_k^{(j)} \; , \quad C_k = const \qquad (32)$$

из 2М линейно не зависимых решений

$$z^{(j)} = \{z_1^{(j)}, z_2^{(j)}, \ldots, z_{2M}^{(j)}\}, \; (j = 1, 2, \ldots, 2M)$$

той же системы (31) с некоторыми начальными условиями.

Для нахождения неизвестных коэффициентов C_k в выражении (32) надо учесть граничные условия на волновые функции (30), которые согласно принятому обозначению (30) определяются решениями (32) с нечетным индексом, т.е. $y_{2n-1}(r)$, $n = 1, \ldots M$. (Можно показать, что волновые функции вблизи начала координат ведут себя как $u \sim r^{L+1/2}$.). Тогда граничные условия $y_{2n-1}(0)=0$ и $y_{2n-1}(\infty)=0$ приводят к линейной системе алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов C_k. Нетривиальное решение этой системы определяется из равенства нулю соответствующего детерминанта $\det \| z_k^{(j)}(E) \| = 0$, которое выполняется не при всех, а при определенных значениях энергии. С помощью подходящих численных процедур можно найти энергетический спектр и соответствующие волновые функции (3) исходной задачи.

Литература

1. Уилкинсон Дж. Алгебраическая проблема собственных значений. – М.: Наука, 1970.
2. Уилкинсон Дж., Райнш Г. Справочник алгоритмов на языке алгол. Линейная алгебра. – М.: Машиностроение, 1976.
3. Болотин Ю.Л., Гончар В.Ю., Тарасов В.Н., Инопин Е.В., Чеканов Н.А. и др. Стохастическая ядерная динамика. ЭЧАЯ, 1989, т.20, вып.4, стр. 878-929.
4. Болотин Ю.Л., Гончар В.Ю., Тарасов В.Н., Чеканов Н.А. Стохастическая динамика квадрупольных колебаний изотопов криптона. Препринт ХФТИ 88-43, М.: ЦНИИатоминформ, 1980.
5. Bolotin Yu.L., Gonchar V.Yu., Tarasov V.N., Chekanov N.A. The transition regularity-Chaos-regularity and statistical properties of energy spectra. Phys.Lett., 1989, v.A135, p.29-32.
6. Bolotin Yu.L., Gonchar V.Yu., Tarasov V.N., Chekanov N.A. The transition regularity-chaos-regularity and statistical properties of wave functions. Phys.Lett., 1990, v.A144, p.459-461.
7. Болотин Ю.Л., Гончар В.Ю., Инопин Е.В., Хаос и катастрофы в квадрупольных колебаниях ядер, ЯФ, 1987, т.45, с.350-356.
8. Bolotin Yu.L., Chekanov E.A., Gonchar V.Yu. et al. Quantum spectra of non-integrable classical systems in transition to chaos region. Preprint JINR E4-90-566, Dubna, 1990.
9. Wilkinson M. Tunneling between tori in phase space. Physics, 1986, v.D 21, p.341-354.
10. Wilkinson M., Hanny J.H. Multidimensional tunneling between excited states. Physica, 1987, v. D 27, p.201-212.
11. Слэтер Дж. Электронная структура молекул. – М.: Мир, 1965.
12. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. – М.: Наука, 1978.
13. Парлет Б. Симметричная проблема собственных значений. Численные методы. – М.: Мир, 1983.
14. Айнс Э.Л. Обыкновенные дифференциальные уравнения. – Харьков: Гос. научно-техн. изд-во Украины, 1989.

Рукопись поступила в издательский отдел
27 апреля 1993 года.