ТЕОРИЯ НАНОСИСТЕМ

УДК 519.68:[519.1+519.6], 51-72:530.145 *Краткое сообщение*

РЕШЕНИЕ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С УЧЕТОМ ЭФФЕКТОВ ТУННЕЛИРОВАНИЯ МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО РАСЧЕТА

И.Н. Беляева[1], И.К. Кириченко[2], О.Д. Пташный[3], Н.А. Чеканов[1], Н.Н. Чеканова[4], Т.А. Ярхо[3]

[1]ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»
308015, Россия, Белгород, ул. Победы, 85
[2]Национальный университет гражданской защиты Украины
61023, Украина, Харьков, ул. Чернышевская, 94
[3]Харьковский Национальный автомобильно-дорожный университет
61002, Украина, Харьков, ул. Ярослава Мудрого, 25
[4]Харьковский учебно-научный институт ГВУЗ «Университет банковского дела»
61202, Украина, Харьков, пр. Победы, 55
ibelyaeva@bsu.edu.ru, chekanov@bsu.edu.ru, ikir238@rambler.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.283

Аннотация: Изложена общая схема метода интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с регулярными особыми точками. Приведен алгоритм нахождения общего решения дифференциального уравнения второго порядка с регулярными особыми точками. Рассмотрено уравнение Шредингера для ангармонического осциллятора с потенциалом четвертой, шестой и восьмой степенями нелинейности, найдены значения его энергетического спектра.

Ключевые слова: обыкновенное дифференциальное уравнение, ангармонический осциллятор, волновая функция, обобщенные степенные ряды.

В настоящее время объектами интенсивных экспериментальных и теоретических исследований являются, в частности, полупроводниковые наноструктуры. В них движение электронов (носителей электрического тока) ограничено и в результате существенно меняется большинство электронных свойств. Движение электронов в микроскопических полупроводниках подчиняется законам квантовой механики и описывается уравнением Шредингера с потенциалом, имеющим несколько локальных минимумов, разделенных барьерами с классически запрещенными областями движения, но возможными из-за квантового явления туннелирования [1-6].

В данной работе изложен метод интегрирования уравнения Шредингера в виде степенных рядов, предложенный ранее в работе [6], и приведены результаты расчетов для уравнения Шредингера с потенциалами с двумя и тремя минимумами для квантовых ангармонических осцилляторов. Представлен также алгоритм построения линейно независимых решений для одномерного уравнения Шредингера, с помощью которых определяется волновая функция [7, 9, 10].

1. Общая схема метода интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с регулярными особыми точками

Рассмотрим уравнение типа

$$y'' + \frac{p(x)}{x-x_0}y' + \frac{q(x)}{(x-x_0)^2}y = 0, \qquad (1)$$

где $p(x)=\sum_{k=0}^{\infty}p_k(x-x_0)^k$, $q(x)=\sum_{k=0}^{\infty}q_k(x-x_0)^k$,сходящиеся степенные ряды, x_0– особая регулярная точка. Находим два линейно независимых решения $y_1(x)$ и $y_2(x)$ задачи Коши (1) со следующими начальными условиями

$$\begin{cases} y_1(x_0)=1, \\ y_1'(x_0)=0, \end{cases} \quad \text{и} \quad \begin{cases} y_2(x_0)=0, \\ y_2'(x_0)=1. \end{cases}$$

Решение уравнения (1) ищем в виде обобщенного ряда

$$y=(x-x_0)^{\rho}\sum_{k=0}^{\infty}a_k(x-x_0)^k,$$

где показатель ρ есть некоторое постоянное число, которое находится из так называемого определяющего уравнения

$$\rho(\rho-1)+p_0\rho+q_0=0.$$

Если корни определяющего уравнения различны и $\rho_1 \ge \rho_2$, а их разность $\rho_1-\rho_2$ не равна целому положительному числу, то два линейно независимых решения имеют вид

$$y_1 = x^{\rho_1}\sum_{k=0}^{\infty}a_k x^k, \quad y_2 = x^{\rho_2}\sum_{k=0}^{\infty}a_k' x^k.$$

Если $\rho_1-\rho_2$ есть целое положительное число, то одно решение, соответствующее корню ρ_1, по-прежнему имеет вид

$$y_1 = x^{\rho_1}\sum_{k=0}^{\infty}a_k x^k,$$

а второе линейно независимое решение можно найти по формуле Остроградского-Лиувилля

$$y_2 = y_1\left\{C\int\frac{e^{-pdx}}{y_1^2}+C'\right\},$$

где $C, C'=const$, и оно может содержать логарифмические члены, а если $\rho_1-\rho_2=0$, то решение обязательно содержит логарифмический член [7].

2. Алгоритм нахождения общего решения дифференциального уравнения второго порядка с регулярными особыми точками

1. Ввод начальных данных: n, x_0– максимальный порядок степенных рядов

и особая точка.

2. Разложение функций $p(x), q(x)$ в степенной ряд.
3. Вычисление коэффициентов разложения $p(x), q(x)$.
4. Вычисление корней определяющего уравнения и нахождение соответствующих корней ρ_1, ρ_2.
5. Оценка значений корней ρ_1, ρ_2 определяющего уравнения.
6. Построение первого решения W_1 в зависимости от полученных значений ρ_1, ρ_2.
7. Вычисление второго линейно-независимого решения W_2 по формуле Остроградского-Лиувилля.
8. Составление общего решения обыкновенного дифференциального уравнения.
9. Сравнение полученных результатов с результатами, полученными при помощи рекуррентных соотношений.

3. Одномерное уравнение Шредингера для ангармонического осциллятора в случае одного минимума

Рассмотрим одномерное уравнение Шредингера для ангармонического осциллятора с потенциалом четвертой, шестой и восьмой степенями нелинейности:

$$\hat{H}_\mu \psi(x) = E\psi(x), \tag{2}$$

$$\hat{H}_\mu \equiv -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2 + \alpha x^\mu, \tag{3}$$

где x – пространственная координата, $\mu = 4,\ 6,\ 8$ – степень нелинейности, α – параметр, $\psi(x)$ – волновая функция и E – спектр оператора (3). Требуется найти спектр оператора (3), т.е. все значения постоянной E, удовлетворяющие уравнению (2). Энергетический спектр задачи (2)-(3) можно рассчитать с помощью степенных рядов. Очевидно, что задача (2)-(3) эквивалентна следующей краевой задаче

$$\psi''(x) + 2\big(E - V(x)\big)\psi(x) = 0,\ \psi(\pm\infty) = 0, \tag{4}$$

в которой потенциал $V(x) \equiv (1/2)^2 + \alpha x^\mu$ ($\mu = 4,\ 6,\ 8$), $\psi''(x) \equiv d^2\psi/dx^2$.

Будем искать фундаментальную систему решений $(\psi_1,\ \psi_2)$ задачи (4) в виде рядов

$$\psi_1(x,E) = 1 + \sum_{k=2}^{\infty} a_k x^k,\ \psi_2(x,E) = x + \sum_{k=2}^{\infty} b_k x^k, \tag{5}$$

где неизвестные коэффициенты a_k и b_k зависят от энергии E и находятся подстановкой рядов (5) в уравнение (4). Первые члены разложения линейно независимых решений (4) $\psi_1(x,E)$ и $\psi_2(x,E)$ имеют вид:

$$\mu=4:\psi_1(x,E)=1-Ex^2+\left(\frac{E^2}{6}+\frac{1}{12}\right)x^4+\left(-\frac{E^3}{90}-\frac{7E}{180}+\frac{\alpha}{15}\right)x^6+$$

$$+\left(\frac{E^4}{2520}+\frac{11E^2}{2520}-\frac{4\alpha E}{105}+\frac{1}{672}\right)x^8+\left(-\frac{E^5}{113400}-\frac{E^3}{4536}+\frac{43\alpha E^2}{9450}+\frac{7\alpha}{2700}-\frac{211E}{453600}\right)x^{10}+\ldots,$$

$$\psi_2(x,E)=x-\frac{E}{3}x^3+\left(\frac{E^2}{30}+\frac{1}{20}\right)x^5+\left(-\frac{E^3}{630}-\frac{13E}{1260}+\frac{\alpha}{21}\right)x^7+$$

$$+\left(\frac{E^4}{22680}+\frac{17E^2}{22680}-\frac{2\alpha E}{189}+\frac{1}{1440}\right)x^9+\left(-\frac{E^5}{1247400}-\frac{E^3}{35640}+\frac{83\alpha E^2}{103950}-\frac{59E}{554400}+\frac{31\alpha}{23100}\right)x^{11}\ldots$$

,

$$\mu=6:\psi_1(x,E)=1-Ex^2+\left(\frac{E^2}{6}+\frac{1}{12}\right)x^4-\left(\frac{E^3}{90}+\frac{7E}{180}\right)x^6+\left(\frac{E^4}{2520}+\frac{11E^2}{2520}+\frac{\alpha}{28}+\frac{1}{672}\right)x^8-$$

$$-\left(\frac{E^5}{113400}+\frac{E^3}{4536}+\frac{211E}{453600}+\frac{29\alpha E}{1260}\right)x^{10}+\ldots,$$

$$\psi_2(x,E)=x-\frac{E}{3}x^3+\left(\frac{E^2}{30}+\frac{1}{20}\right)x^5-\left(\frac{E^3}{630}+\frac{13E}{1260}\right)x^7+\left(\frac{E^4}{22680}+\frac{17E^2}{22680}+\frac{\alpha}{36}+\frac{1}{1440}\right)x^9-$$

$$-\left(\frac{E^5}{1247400}+\frac{E^3}{35640}+\frac{59E}{554400}+\frac{13\alpha E}{1980}\right)x^{11}+\ldots,$$

$$\mu=8:\psi_1(x,E)=1-Ex^2+\left(\frac{E^2}{6}+\frac{1}{12}\right)x^4-\left(\frac{E^3}{90}+\frac{7E}{180}\right)x^6+\left(\frac{E^4}{2520}+\frac{11E^2}{2520}+\frac{1}{672}\right)x^8-$$

$$-\left(\frac{E^5}{113400}+\frac{E^3}{4536}+\frac{211E}{453600}+\frac{\alpha}{45}\right)x^{10}+\ldots,$$

$$\psi_2(x,E)=x-\frac{E}{3}x^3+\left(\frac{E^2}{30}+\frac{1}{20}\right)x^5-\left(\frac{E^3}{630}+\frac{13E}{1260}\right)x^7+$$

$$+\left(\frac{E^4}{22680}+\frac{17E^2}{22680}+\frac{1}{1440}\right)x^9-\left(\frac{E^5}{1247400}+\frac{E^3}{35640}+\frac{59E}{554400}-\frac{\alpha}{55}\right)x^{11}+\ldots.$$

Следуя общей теории решения дифференциальных уравнений, общее решение задачи (4) запишем в виде

$$\psi(x)=C_1\psi_1(x)+C_2\psi_2(x),$$

где C_1 и C_2 – произвольные постоянные. Для того чтобы общее решение $\psi(x)$ удовлетворяло начальным условиям $\psi(\pm\infty)=0$, необходимо выбрать произвольные постоянные C_1 и C_2 таким образом, чтобы система

$$\begin{cases}C_1\psi_1(-R,E)+C_2\psi_2(-R,E)=0,\\ C_1\psi_1(R,E)+C_2\psi_2(R,E)=0\end{cases}\qquad(6)$$

имела нетривиальные решения. В системе (6) параметр R играет роль бесконечности. Подбирая его значения, необходимо получить совпадение собственных значений в наибольшем количестве первых десятичных знаков, в частности, для нижних уровней энергии в наших расчетах $R \in (4{,}10; 4{,}15]$. Приравнивая к нулю определитель системы (6), получим уравнение относительно E, корни которого являются спектром задачи (2)-(3). Для каждого вычисленного корня E_n система (6) имеет единственное решение $C_1^{(n)}$ и $C_2^{(n)}$, поэтому волновая функция n-го энергетического уровня имеет вид

$$\psi_n(x) = C_1^{(n)}\psi_1(x) + C_2^{(n)}\psi_2(x).$$

Таким образом, данный метод позволяет не только вычислить собственные значения рассматриваемого оператора, но и позволяет рассчитать его волновые функции.

4. Значения энергетического спектра уравнения Шредингера для ангармонических осцилляторов

Для получения уровней энергии и волновых функций гамильтониана (3) описанным выше методом составлена программа в среде Maple 11.

Таблица 1.Сравнение собственных значений оператора (3), полученных различными методами при различных μ, α

$\mu = 4$, $\alpha = 10^{-3}$			
n	Спектр E_{PS}	Спектр E_{QM} [49c]	ε
0	1,000748	1,000748	$3\cdot10^{-5}$
1	3,00374	3,00373	$2\cdot10^{-4}$
2	5,0098	5,0097	$2\cdot10^{-3}$
3	7,019	7,0186	0,017
4	9,045	9,0305	0,165
$\mu = 6$, $\alpha = 10^{-4}$			
0	1,00018	1,00018	0
1	3,0013	3,0013	0
2	5,0047	5,0046	$9\cdot10^{-5}$
3	7,012	7,011	0,014
4	9,033	9,023	0,1
$\mu = 8$, $\alpha = 10^{-5}$			
0	1,00006	1,00006	0
1	3,00059	3,00058	$3\cdot10^{-3}$
2	5,0027	5,0026	$2\cdot10^{-3}$
3	7,0095	7,0083	0,016
4	9,03	9,02	0,12

Здесь через n обозначен номер уровня, E_{PS} – значения энергии, полученные при помощи степенных рядов, E_{QM} – значения энергии [8], ε – относительные отклонения уровней энергии от значений [8].

В Таблице 1 приведены сравнения значений энергетического спектра оператора Шредингера, вычисленных с помощью упомянутой программы, с результатами работы [8], в которой приведены наиболее достоверные значения спектров ангармонических осцилляторов. Как видно из Таблицы 1, имеется хорошее согласие результатов при данных значениях параметров.

5. Одномерное уравнение Шредингера в случае двухямного потенциала

Рассмотрена исходная задача решения дифференциального уравнения (2)-(3) с двухямным потенциалом [9]

$$V(x) \equiv \alpha\left(x^2 - a^2\right)^2.$$

Данная задача представлена в виде решения уравнения вида

$$\psi''(x) + 2\big(E - V(x)\big)\psi(x) = 0, \quad \psi(\pm\infty) = 0, \tag{7}$$

для которого найдена фундаментальная система решений в виде степенных рядов

$$\psi_1(x,E) = 1 + \sum_{k=2}^{\infty} a_k x^k, \quad \psi_2(x,E) = x + \sum_{k=2}^{\infty} b_k x^k,$$

где неизвестные коэффициенты a_k и b_k зависят от энергии. Вычисления были проведены с использованием математического пакета Maple 11.

Первые члены ряда (5) имеют вид

$$1 + (-E + 16\alpha)x^2 + \left(\frac{1}{6}E^2 - \frac{16}{3}E\alpha + \frac{128}{3}\alpha^2 - \frac{4}{3}\alpha\right)x^4 +$$
$$+\left(-\frac{1}{90}E^3 + \frac{8}{15}E^2\alpha - \frac{128}{15}E\alpha^2 + \frac{28}{45}E\alpha + \frac{2048}{45}\alpha^3 - \frac{448}{45}\alpha^2 + \frac{1}{15}\alpha\right)x^6,$$

$$x + \left(-\frac{1}{3}E + \frac{16}{3}\alpha\right)x^3 + \left(\frac{1}{30}E^2 - \frac{16}{15}E\alpha + \frac{128}{15}\alpha^2 - \frac{4}{5}\alpha\right)x^5 +$$
$$+\left(-\frac{1}{630}E^3 + \frac{8}{105}E^2\alpha + \frac{52}{315}E\alpha - \frac{128}{105}E\alpha^2 + \frac{2048}{315}\alpha^3 - \frac{832}{315}\alpha^2 + \frac{1}{21}\alpha\right)x^7.$$

Общее число членов в рядах (5) (number of members) в вычислениях (при $\alpha = 0{,}5$) варьировалось от 195 и до 198 в зависимости от высоты энергетического уровня. Причем для построения волновых функций нижних уровней приходилось удерживать больше слагаемых, т.к. точность значительно падает при увеличении толщины потенциального барьера.

Библиографический список:

1. **Демиховский, В.Я.** Физика квантовых низкоразмерных структур / В.Я. Демиховский. – М.: Логос, 2000. – 248 с.
2. **Давыдов, А.С.** Квантовая механика / А.С.Давыдов. – М.: Наука, 1973. – 704с.

3. **Шрёдингер, Э.** Избранные труды по квантовой механике / Э. Шрёдингер.– М.: Наука, 1976. – 422 с.
4. **Belyaeva, I.N.**A symbolic-numeric approach for solving the eigenvalue problem for the one-dimensional Schrödinger equation/ I.N. Belyaeva, N.A. Chekanov, A.A. Gusev, V.A. Rostovtsev, S.I. Vinitsky // In: Computer Algebra in Scientific Computing. CASC 2006. Lecture Notes in Computer Science; ed. by V.G. Ganzha, E.W. Mayr, E.V. Vorozhtsov. – Springer, Berlin, Heidelberg, 2006. – V.4194. – P. 23-32.
5. **Беляева, И.Н.** Метод решения одномерного уравнения Шредингера при помощи степенных рядов / И.Н. Беляева, Н.А. Чеканов // Вестник Тамбовского государственного университета. –2006. – Т. 11. – Вып. 2. – С. 168-171.
6. **Беляева, И.Н.** Аналитически-численный метод решения краевой задачи уравнения Шредингера / И.Н. Беляева, И.А. Кузнецова, Н.А. Чеканов // Вестник Херсонского университета.– 2006. – Вып. 2(25) – С. 40-46.
7. **Трикоми, Ф.** Дифференциальные уравнения / Ф. Трикоми. – М.: Издательство иностранной литературы, 1962. – 352 с.
8. **Banerjee, K.** The anharmonic oscillator / K. Banerjee, S. P. Bhatnagar, V. Choudhry and S. S. Kanwal //Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. – 1978. – V.360. – I. 1703. – P.575-586.
9. **Van der Straeten, E.** The quantum doble-well anharmonic oscillator in external field/ E. Van der Straeten, J. Naudts //Journal of Physics A: Mathematical and General. – 2006. – V. 39. – № 4. –P. 933-940.
10. **Чеканов, Н.А.** Символьно-численные методы решения дифференциальных уравнений классической и квантовой механики / Н.А. Чеканов, И.Н. Беляева, И.К. Кириченко, Н.Н. Чеканова. – Харків: «ІСМА», 2019. – 420 с.

References:

1. **Demikhovskij, V.Ya.** Physics of quantum low-dimensional structures / V.Ya. Demikhovskij. – M.: Logos, 2000. – 248 p. (In Russian).
2. **Davydov, A.S.** Quantum mechanics / A.S. Davydov. – M.: Nauka, 1973. – 704 p. (In Russian).
3. **Schrödinger, E.** Selected works on quantum mechanics / E. Schrödinger. – M.: Nauka, 1976. – 422 p. (In Russian).
4. **Belyaeva, I.N.** A symbolic-numeric approach for solving the eigenvalue problem for the one-dimensional Schrödinger equation / I.N. Belyaeva, N.A. Chekanov, A.A. Gusev, V.A. Rostovtsev, S.I. Vinitsky // In: Computer Algebra in Scientific Computing. CASC 2006. Lecture Notes in Computer Science; ed. by V.G. Ganzha, E.W. Mayr, E.V. Vorozhtsov. – Springer, Berlin, Heidelberg, 2006. – V. 4194. – P. 23-32.
5. **Belyaeva, I.N.** Method for solving the one-dimensional Schrödinger equation using power series / I.N. Belyaeva, N.A. Chekanov // Vestnik Tambovskogo gosudarstvennogo universiteta. – 2006. – V. 11. – I. 2. – P. 168-171. (In Russian).
6. **Belyaeva, I.N**. Analytical-numerical method for solving the boundary value problem of the Schrödinger equation / I.N. Belyaeva, I.A. Kuznetsova, N.A. Chekanov // Vestnik Khersonskogo universiteta. – 2006. – I. 2(25) – P. 40-46. (In Russian).
7. **Trikomi, F.** Differential equations / F. Trikomi. – M.: Izdatel'stvo inostrannoj literatury, 1962. – 352 352p. (In Russian).
8. **Banerjee, K.** The anharmonic oscillator / K. Banerjee, S. P. Bhatnagar, V. Choudhry and S. S. Kanwal //Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering

Sciences. – 1978. – V. 360. – I. 1703. – P. 575-586.
9. **Van der Straeten, E.** The quantum doble-well anharmonic oscillator in external field / E. Van der Straeten, J. Naudts // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 2006. – V. 39. – № 4. – P. 933-940.
10. **Chekanov, N.A.** Symbol-numerical methods for solving differential equations of classical and quantum mechanics / N.A. Chekanov, I.N. Belyaeva, I.K. Kirichenko, N.N. Chekanova. – Kharkiv: «ISMA», 2019. – 420 p. (In Russian).

Short communication

THE COMPUTER – ASSISTED SOLUTION OF THE ONE – DIMENSIONAL SCHRÖDINGER EQUATION TAKING INTO ACCOUNT TUNNELING EFFECTS

I.N. Belyaeva[1], I.K. Kirichenko[2], O.D. Ptashnyi[3], N.N. Chekanova[4], N.A. Chekanov[1], T.A. Yarkho[3]
[1]*Belgorod National Research University, Belgorod, Russia*
[2]*National University of Civil Defence of Ukraine, Kharkiv, Ukraine*
[3]*Kharkiv National Automobile and Highway University, Kharkiv, Ukraine*
[4]*Kharkiv Educational and Research Institute of the Higher Educational Institution «University of Banking», Kharkiv, Ukraine*

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.283

Abstract: The general scheme of the method of integration of the second order ordinary differential equations with regular singular points is outlined. The algorithm of finding a general solution of the second order differential equation with regular singular points is given. The Schrödinger equation for anharmonic oscillator with the potential of the fourth, sixth and eighth degrees of non-linearity is considered, the values of its energy spectrum are found.

Keywords: ordinary differential equation, anharmonic oscillator, wave function, generalized power series.

Беляева Ирина Николаевна – к.ф.–м.н., доцент, доцент кафедры информатики, естественнонаучных дисциплин и методики преподавания, ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»
Кириченко Игорь Константинович – д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры физико-математических дисциплин Национального университета гражданской защиты Украины
Пташный Олег Дмитриевич – к.п.н., доцент, доцент кафедры высшей математики Харьковского национального автомобильно-дорожного университета
Чеканова Наталья Николаевна – к.ф.–м.н., доцент, доцент кафедры информационных технологий Харьковского учебно-научного института ГВУЗ «Университет банковского дела»
Чеканов Николай Александрович – д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры дифференциальных уравнений, ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»
Ярхо Татьяна Александровна – д.п.н., доцент, заведующий кафедрою высшей математики Харьковского национального автомобильно-дорожного университета

Irina N. Belyaeva – Ph. D, Docent, Department of Computer Science, Natural Sciences and Teaching Methods, Belgorod National Research University
Igor K. Kirichenko – Dr. Sc., Professor, Department of physical and mathematical sciences, National University of Civil Defence of Ukraine
Oleg D. Ptashnyi –Ph. D, Docent, Department of Higher Mathematics, Kharkiv National Automobile and Highway University
Natalia N. Chekanova – Ph. D, Docent, Department of Information Technology Kharkiv Educational and Research Institute of the Higher Educational Institution «University of Banking»
Nikolai A. Chekanov –Dr. Sc., Professor, Department of Computer Science, Natural Sciences and Teaching Methods, Belgorod National Research University
Tetyana A. Yarkho – Dr. Sc., Docent, Department of Higher Mathematics, Kharkiv National Automobile and Highway University

Поступила в редакцию/received: 10.09.2019; после рецензирования/revised: 19.10.2019; принята/accepted 04.11.2019.