

УДК 530.145.61
DOI 10.17223/19988621/433/3

Е.Ю. Мицарина, Э.Е. Либин, М.А. Бубенчиков

О РЕШЕНИИ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Уравнение Шредингера описывает квантово-механические процессы, происходящие при движении частиц через потенциальный барьер. В такой задаче, нужно находить плотность вероятности частиц и проследить ее эволюцию во времени. Результаты такой теории находят применения в ряде вопросов теоретической физики, например в нанотехнологиях, где нужно вычислять накопления материальных частиц в потенциальных ямках. Зависящее от времени уравнение Шредингера имеет прямую аналогию с уравнением теплопроводности. Поэтому в качестве численного алгоритма применяется метод матричной экспоненты, применяемый ранее для решения уравнения теплопроводности.

Ключевые слова: амплитуда вероятности, уравнение Шредингера, матричная экспонента, уравнение теплопроводности, потенциальные барьеры.

Постановка задачи

Известное из квантовой механики [1, 2] уравнение Шредингера имеет следующий вид:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} + U(x, y, z) \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = 0. \quad (1)$$

При надлежащем выборе масштабов по переменным x и t его записывают также в нормализованной форме:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = i(\Delta - U(x, y, z)) \psi. \quad (2)$$

Нетрудно заметить, что уравнение (2) тесно связано с уравнением теплопроводности вида

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = (\Delta - U(x, y, z)) \theta. \quad (3)$$

Связь между функциями ψ и θ такова, что если мы знаем какое-либо решение уравнения (3), записанное в форме $\theta = \theta(x, y, z, t)$, то связанное с ним решение уравнения (2) имеет следующий вид: $\psi = \theta(x, y, z, it)$, то есть просто сводится к замене вещественного времени t его мнимой величиной it . При этом функция ψ всегда оказывается комплексной величиной, даже если функция θ – вещественна. Квадрат модуля функции ψ в квантовой механике интерпретируется как вероятность локализации частицы в элементарном объеме, и величину ψ называют поэтому амплитудой вероятности.

Если из уравнения (2) исключить время, положив, что $\psi = \Psi \exp(-ik^2 t)$, то тогда для функции Ψ получается стационарное уравнение Шредингера, имеющее вид

$$\Delta \Psi + (k^2 - U(x, y, z)) \Psi = 0. \quad (4)$$

Это уравнение, не содержащее времени, легче поддается решению, чем уравнение (2) и применяется, в основном, для описания прохождения частиц через потенциальный барьер или для нахождения его собственных чисел и собственных функций этого оператора.

Трудность аналитического или численного решения нестационарного уравнения (2) или (3) возникает из-за наличия переменного коэффициента $U(x, y, z)$ в этих уравнениях. Таким образом, задача состоит в выборе эффективного метода решения уравнения теплопроводности (3).

Одномерная задача. Точные решения

В одномерном случае, когда функция ψ зависит только от одного пространственного аргумента x , уравнения (2) и (3) записываются в виде

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = i \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - U(x) \right) \psi, \quad \frac{\partial \theta}{\partial t} = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - U(x) \right) \theta. \quad (5)$$

При произвольно заданном потенциальном барьере $U(x)$ уравнения (5) не могут быть решены в явной аналитической форме. Поэтому, чтобы выяснить общий характер поведения решений, рассмотрим сначала случай, когда отсутствует потенциальный барьер, т.е. когда $U(x) = 0$, и уравнения (5) имеют вид

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = i \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}. \quad (6)$$

Рассмотрим два примера точных решений уравнений (6).

Пример 1. На бесконечном интервале изменения переменной $-\infty < x < \infty$, одно из частных решений уравнения теплопроводности и соответственно уравнения Шредингера будет следующим:

$$\theta(x, t) = \frac{\exp\left(\frac{-x^2}{1+4t}\right)}{\sqrt{1+4t}}, \quad \psi(x, t) = \frac{\exp\left(\frac{-x^2}{1+4it}\right)}{\sqrt{1+4it}}, \quad \rho(x, t) = |\psi|^2 = \frac{\exp\left(\frac{-2x^2}{1+16t^2}\right)}{\sqrt{1+16t^2}}. \quad (7)$$

Здесь $\rho(x, t)$ — плотность вероятности локализации частицы в точке с координатами (x, t) .

Из формул (7) видно, что как температура θ , так и плотность вероятности $\rho(x, t)$ монотонно убывают с ростом величин x и t , хотя они и ведут себя при этом по-разному.

Пример 2. Методом разделения переменных и разложением в ряд Фурье можно найти следующее решение уравнений (6), определенное на конечном интервале переменной $0 < x < L$:

$$\theta = \frac{4}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin \lambda x}{\lambda} e^{-\lambda^2 t}, \quad \psi = \frac{4}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin \lambda x}{\lambda} e^{-i\lambda^2 t}, \quad \lambda = \frac{\pi(2n-1)}{L}. \quad (8)$$

Оно соответствует нулевым граничным условиям на концах интервала и постоянному (единичному) начальному распределению температуры. Вычисленные по формулам (8) значения амплитуды вероятности $|\psi|^2$ в точках плоскости (x, t) показаны на рис. 1. Повышенная амплитуда вероятности $|\psi|^2$ отмечена на нем бо-

лее темным цветом. Видно, что функция ψ совершает непрерывающиеся бесконечные колебания во времени. Этот рисунок демонстрирует сложную периодическую по времени структуру поведения амплитуды вероятности. Этим свойством и отличается решение нестационарного уравнения Шредингера от решения связанного с ним уравнения теплопроводности, которое, согласно формулам (8), всегда очень быстро убывает по времени.

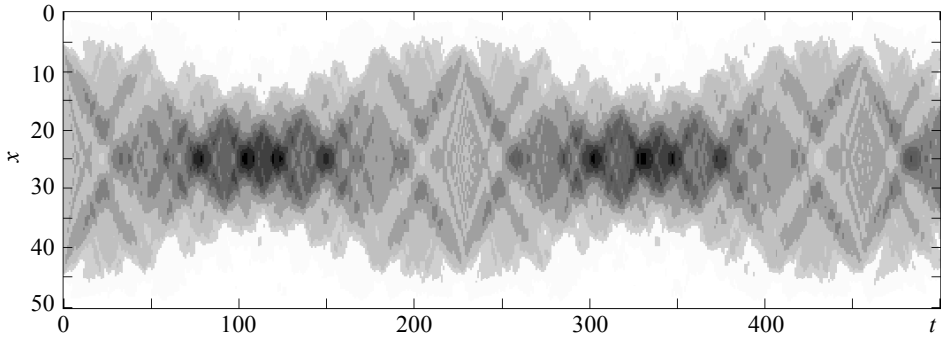


Рис. 1. Пространственно-временное поведение амплитуды вероятности
Fig. 1. Space-time behavior of the probability amplitude

На рис. 2 показан график среднего по времени (на участке T) значения функции $|\psi|^2$, который определяется из выражения

$$\hat{\rho}'(x) = \frac{1}{T} \int_0^T |\psi(x,t)|^2 dt. \quad (9)$$

Такой график показывает, что материальная частица большую часть своего времени проводит в средней области участка $0 < x < L$.

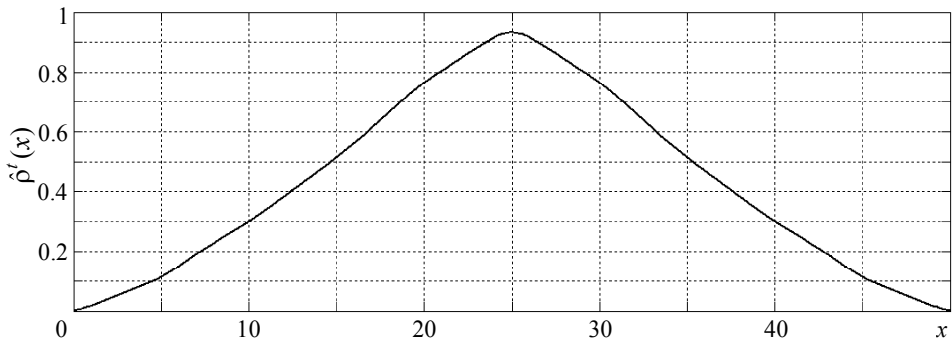


Рис. 2. График осредненного по времени значения амплитуды вероятности
Fig. 2. Plot of the time-averaged value of the probability amplitude

Вычисление методом матричной экспоненты

Решение однородного уравнения теплопроводности вида (6) можно формально записать в символической форме, имея ввиду разложение показательного дифференциального оператора в ряд Тейлора:

$$\theta(x, t) = e^{t \frac{\partial^2}{\partial x^2}} \theta(x, 0) = \left[1 + t \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{t^2}{2!} \frac{\partial^4}{\partial x^4} + \frac{t^3}{3!} \frac{\partial^6}{\partial x^6} + \frac{t^4}{4!} \frac{\partial^8}{\partial x^8} + \dots \right] \theta(x, 0). \quad (10)$$

Так, например, нетрудно непосредственно проверить, что если $\theta(x, 0)$ – многочлен по переменной x , то ряд в формуле (10) обрывается и мы получаем точное решение уравнения теплопроводности (6).

С другой стороны, при численной реализации решения, оператор дифференцирования по переменной x обычно заменяется его конечно-разностной аппроксимацией

$$\frac{\partial^2 \theta_n}{\partial x^2} \approx \frac{\theta_{n-1} - 2\theta_n + \theta_{n+1}}{h^2} \quad (11)$$

Таким образом, оператор дифференцирования – это трехдиагональная квадратная матрица H_2 , действующая на вектор-столбец состоящий из чисел θ_n , $n = 1, 2, 3, \dots, N$. В таком случае, имея ввиду, что θ – это векторы-столбцы, мы можем просто записывать решение (10) в векторно-матричном виде

$$\theta(x, t) = \exp m(tH_2) \cdot \theta(x, 0). \quad (12)$$

Функция от матрицы $f(A) = e^A$, известная как матричная экспонента, является стандартной программой в ряде вычислительных систем, и ею всегда можно воспользоваться. Такой подход применялся в работе [3], где с помощью матричной экспоненты успешно решалась задача с начальным условием как для одномерного, так и для двумерного уравнения теплопроводности.

Ясно, что таким же способом можно решать и более общее уравнение (5), где учитывается влияние потенциального барьера $U(x)$. Там только нужно от дифференциального оператора H_2 отнять диагональную матрицу $U(x_i)$, тогда получим

$$\psi(x, t) = e^{iHt} \psi(x, 0), \quad \theta(x, t) = e^{iHt} \theta(x, 0), \quad H = H_2 - \text{diag}(U). \quad (13)$$

Отметим следующие свойства расчета решения уравнения Шредингера методом матричной экспоненты:

1. Возможность учитывать наличие потенциальных барьеров в уравнении Шредингера, что практически нельзя осуществить аналитическими методами.
2. Время входит непосредственно как параметр матричной экспоненты.
3. Вычисление матричной экспоненты для матрицы H при $N < 300$ занимает время порядка 3–5 с. Таким образом, этот способ обладает высоким быстродействием и точностью.
4. Автоматическое выполнение нулевого граничного условия на концах интервала обусловлено выбором конструкцией матрицей H_2 в виде формулы (11).

Результаты расчетов

На рис. 3 – 6 приведены результаты расчетов по нашей программе для некоторых случаев расположения потенциальных барьеров в этой области решения. На них представлена диаграмма распределения амплитуды вероятности, а также ее среднее значение по времени.

Из рис. 3 видно, что амплитуда вероятности минимальна внутри барьеров и максимальна в средней части между ними. Проникновение частиц через оба барьера объясняется тем, что начальное условие в этой области было отлично от нуля.

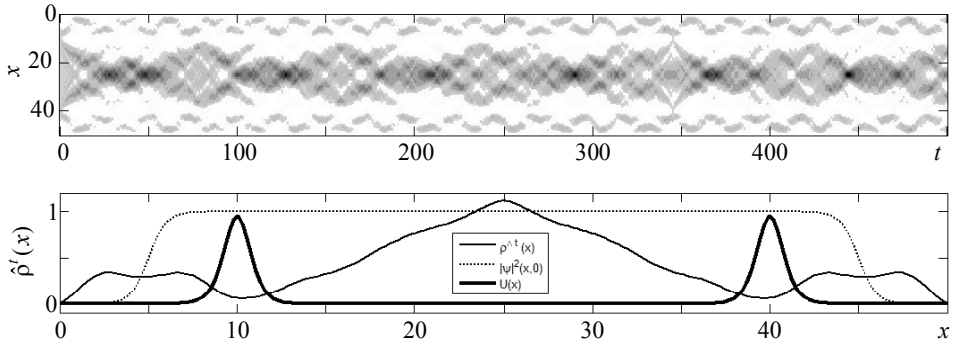


Рис. 3. Распределение амплитуды вероятности и его среднее значение по времени
Fig. 3. Probability amplitude distribution and its mean value over time

Если барьеры отодвинуть к концам интервала, то проникновение через барьер исчезает (рис. 4).

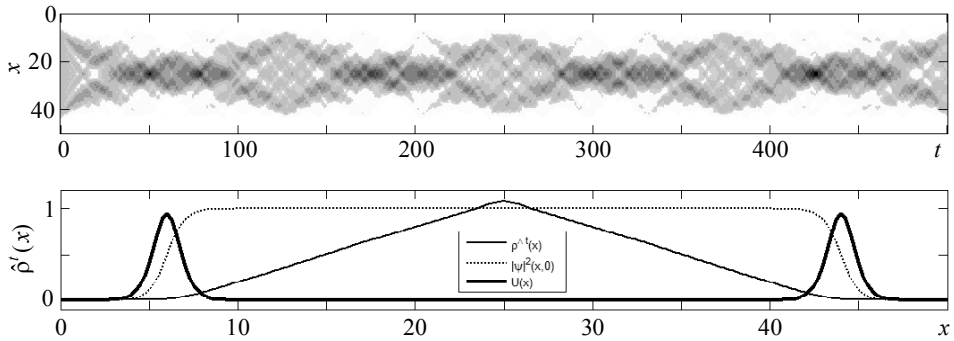


Рис. 4. Распределение амплитуды вероятности и его среднее значение по времени
Fig. 4. Probability amplitude distribution and its mean value over time

Если между крайними барьерами вставить еще один промежуточный барьер (рис. 5), то появляются два максимальных пика амплитуды вероятности.

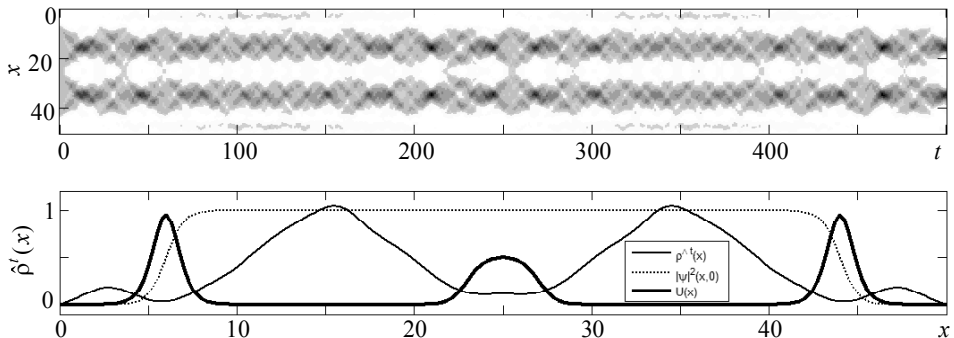


Рис. 5. Распределение амплитуды вероятности и его среднее значение по времени
Fig. 5. Probability amplitude distribution and its mean value over time

А если заменить средний барьер потенциальной ямкой (рис. 6), то максимальная вероятность локализуется в области этой ямки.

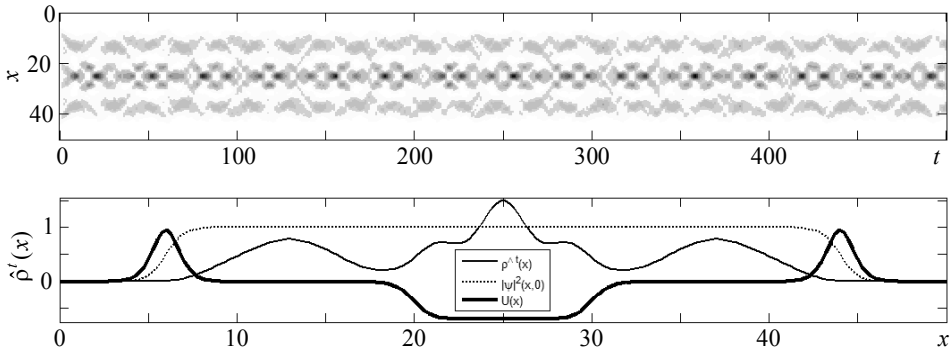


Рис. 6. Распределение амплитуды вероятности и его среднее значение по времени
Fig. 6. Probability amplitude distribution and its mean value over time

Такого эффекта следовало ожидать, так как частицы должны накапливаться в области с минимальной энергией.

Заключение

Применение методов матричной экспоненты к решению нестационарного уравнения Шредингера дало ожидаемые результаты при вычислении амплитуды вероятности. Наибольшее накопление частиц происходит в ямках потенциального барьера. Эту технологию можно распространить и на двумерные задачи, которые представляют больший научный интерес для объяснения явления абсорбции в подобных вопросах.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Feshbach H., Morse Ph.M.* Methods of Theoretical Physics. Part II. New York: McGraw-Hill, 1953. 997 p.
2. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. М.: Наука, 1969. Т. III: Квантовая механика. Нерелятивистская теория. 767 с.
3. *Терновых Е.Ю.* Применение матричных разностных операторов для решения уравнения теплопроводности // Актуальные проблемы современной механики сплошных сред. Всероссийская молодежная научная конференция. Томск, 16–19 октября 2010 г. Тез. докл. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2010. С. 209–211 .

Статья поступила 16.06.2016 г.

Mishcharina E.Yu., Libin E.E., Bubenchikov M.A. (2016) ON THE SOLUTION OF THE NON-STATIONARY SCHRÖDINGER EQUATION *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 5(43). pp. 28–34

DOI 10.17223/19988621/433/3

The Schrödinger equation describes quantum mechanics processes occurring when particles pass through a potential barrier. In this problem, it is necessary to find the probability density of particles and to track its evolution in time. In this paper, it is shown that time-dependent Schrödinger's equation has a direct analogy to the heat conductivity equation, differing from it in the imaginary time. As a numerical method of the decision, it is offered to apply the method of

matrix exponential function in which a finite difference analogue of the one-dimensional Laplacian is considered as a matrix operating on a vector. This way of the solution allows one to consider potential barriers of any form in the Schrödinger equation. Time is included now into the decision as a parameter, and it allows one to get rid of the necessity of time quantization and to do it only on a spatial variable. In this aspect, this way favorably differs from traditional ways of solving evolutionary equations which use quantization both on time and on a spatial variable. Results of numerical experiments show that the greatest amplitudes of probability are localized in the field of minima of potential barriers.

Keywords: probability amplitude, Schrödinger equation, matrix exhibitor, heat conductivity equation, potential barriers.

MISHCHARINA Elena Yuryevna (Tomsk State University, Tomsk, Russia)

E-mail: sweetyhemp@gmail.com

LIBIN Eduard Efimovich (Candidate of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russia)

BUBENCHIKOV Mikhail Alekseevich (Candidate of Physics and Mathematics, Gazprom Transgaz Tomsk Ltd., Tomsk, Russia)

E-mail: m.bubenchikov@gtt.gazprom.ru

REFERENCES

1. Feshbach H., Morse Ph. M. (1953) *Methods of Theoretical Physics. Part II*. New York: McGraw-Hill.
2. Landau L.D., Lifshits E.M. (1969) *Kvantovaya mekhanika. Nerelyativistskaya teoriya* [Quantum mechanics. Nonrelativistic theory]. Moscow: Nauka.
3. *Ternovyykh E. Yu.* (2010) Primenenie matrichnykh raznostnykh operatorov dlya resheniya uravneniya teploprovodnosti [Application matrix difference operators for the solution of the thermal conductivity equation]. *Aktual'nye problemy sovremennoy mekhaniki sploshnykh sred.* [Current Problems of Present-Day Continuum Mechanics]. Proc. of the All-Russia youth Conference. Tomsk: TGU Publ. pp. 209–211.