

01;07;08;09

О РЕШЕНИИ ДВУХМЕРНОГО СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С ПОТЕНЦИАЛОМ СПЕЦИАЛЬНОГО ВИДА

© B.A. Карпенко

Институт прикладной оптики АН Белоруссии,
212793 Могилев, Белоруссия

(Поступило в Редакцию 28 июля 1995 г.)

Двухмерная задача на собственные значения и собственные функции, принадлежащие дискретному спектру, приближенно сведена к одномерной задаче для случая, когда потенциал $\varepsilon(x, y)$ представим в виде $\varepsilon(x, y) = \varepsilon_1(x)$ при $|y| > b$, $\varepsilon(x, y) = \varepsilon_2(x)$ при $|y| \leq b$. Установлена связь принятого нулевого приближения с результатом метода самосогласованного поля.

Введение

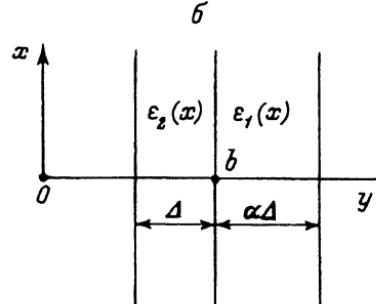
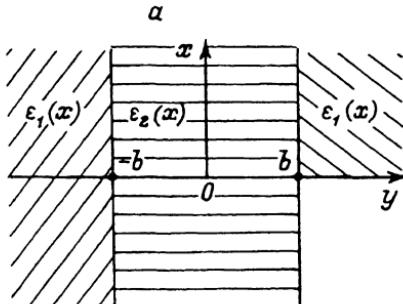
Двухмерное стационарное уравнение Шредингера

$$(\nabla_x^2 + \nabla_y^2 + \mu\varepsilon(x, y) - \lambda)\varphi(x, y) = 0 \quad (1)$$

с постоянными параметрами μ и λ может описывать канализование частиц в поле потенциала $\varepsilon(x, y)$, а также канализование упругих и электромагнитных волн в неоднородных средах [1-3]. В этой связи практический интерес представляют решения уравнения (1), принадлежащие дискретному спектру собственных значений λ .

Ниже излагается приближенная процедура построения таких решений для потенциала специального вида $\varepsilon(x, y) = \varepsilon_1(x)$ при $|y| > b$, $\varepsilon(x, y) = \varepsilon_2(x)$ при $|y| \leq b$ (см. рисунок, а). В теории оптических волноводов, например, указанная зависимость потенциала от координат описывает класс планарных волноводов конечной ширины (прямоугольных в однородной среде, на подложке или внедренных в нее гребневых) и планарных волноводов, нагруженных полоской, и др.

Для прямоугольной потенциальной ямы $\varepsilon_1(x) \equiv 0$, $\varepsilon_2(x) = \text{const}$ при $|x| \leq a$, $\varepsilon_2(x) = 0$ при $|x| > a$ известны численные методы [3-5] решения уравнения (1). В данной работе основная идея решения заключается в приближенном сведении уравнения (1) к одномерной задаче. Она осуществляется с помощью метода частичных областей и вариационного



Схематическое распределение потенциала в плоскости (x, y) , где вертикальные прямые $y = \pm b$ являются границами частичных областей (а), и изображение полоски, включающей границу раздела частичных областей $y = b$ (б).

принципа. В ряде частных случаев $\varepsilon_1(x)$ и $\varepsilon_2(x)$, в том числе для прямоугольной потенциальной ямы, одномерная задача имеет аналитические решения. Для общего случая $\varepsilon_1(x)$ и $\varepsilon_2(x)$ показано, что вычисление собственного значения λ в принятом нулевом приближении совпадает с его вычислением методом самосогласованного поля [6].

Формулировка задачи

Исходная идея решения уравнения (1) заключается в нахождении общих представлений искомой функции $\varepsilon(x, y)$ в частичных областях и в последующем согласовании этих представлений на соответствующих границах раздела. Для нахождения упомянутых представлений воспользуемся методом разделения переменных. Для центральной частичной области $|y| < b$, учитывая свойство симметрии потенциала $\varepsilon(x, y) = \varepsilon(x, -y)$, положим

$$\varphi(x, y) = \varphi^{(2)}(x) \begin{cases} \cos vy \\ \sin vy \end{cases}. \quad (2)$$

Тогда из (1) следует, что

$$[\nabla_x^2 + \mu\varepsilon_2(x) - (\lambda + v^2)]\varphi^{(2)}(x) = 0. \quad (3)$$

Решения $\varphi^{(2)}(x)$, принадлежащие действительным собственным значениям $\lambda + v^2$, образуют полный набор ортогональных функций. Поэтому из парциальных решений (2) можно образовать общее представление искомой функции при $|y| < b$

$$\varphi(x, y) = \sum_n a_n^{(2)} \varphi_n^{(2)}(x) \begin{cases} \cos v_n y / \cos v_n b \\ \sin v_n y / \sin v_n b \end{cases}. \quad (4)$$

Аналогично для боковых частичных областей $|y| > b$ можно записать

$$\varphi(x, y) = \sum_m a_m^{(1)} \varphi_m^{(1)}(x) \exp[-w_m(|y| - b)], \quad (5)$$

где функции $\varphi_m^{(1)}(x)$ являются решениями уравнения

$$\left[\nabla_x^2 + \mu \varepsilon_1(x) - (\lambda - w_m^2) \right] \varphi_m^{(1)}(x) = 0. \quad (6)$$

Следует отметить, что $\varphi_n^{(2)}(x)$ и $\varphi_m^{(1)}(x)$ могут принадлежать как дискретному, так и непрерывному спектрам собственных значений. Поэтому запись выражений (4), (5) является условной, подразумевающей как суммирование, так и интегрирование. Кроме того, использование разложений (4), (5) в конкретных расчетах имеет смысл в том случае, когда решения уравнений (3), (6) известны в аналитическом виде. Это условие выполняется, в частности, для кусочно-постоянных функций $\varepsilon_1(x)$ и $\varepsilon_2(x)$, а также для некоторых непрерывных функций, представленных в работе [7]. Поэтому параметры v_n и w_m , входящие в разложения (4), (5), предполагаются известными функциями собственного значения λ .

Покажем теперь, что волновая функция $\varphi(x) = \varphi(x, b)$ на границе частичных областей $y = b$ определяет соответствующее решение задачи (1). Коэффициенты разложений (4), (5) для нормированных $\varphi_n^{(2)}(x)$ и $\varphi_m^{(1)}(x)$

$$a_n^{(2)} = \int \varphi(x) \varphi_n^{(2)}(x) dx, \quad a_m^{(1)} = \int \varphi(x) \varphi_m^{(1)}(x) dx$$

находятся из условия непрерывности $\varphi(x, y)$ при $y = b$. Далее, исходя из функционала

$$\lambda = \iint [\mu \varepsilon \varphi^2 - (\nabla \varphi)^2] dx dy / \iint \varphi^2 dx dy, \quad (7)$$

стационарного на решениях уравнения (1), можно показать, что выражениями (4), (5) равенство (7) удовлетворяется тождественно при условии

$$\int \varphi(x) [\nabla_y \varphi(x, b-0) - \nabla_y \varphi(x, b+0)] dx = F(\lambda) = 0. \quad (8)$$

Это — характеристическое уравнение для нахождения собственных значений λ . Таким образом, в рассматриваемой задаче в рамках вариационного принципа можно пользоваться пробной функцией одной координаты, имеющей смысл волновой функции на границе раздела $y = b$. Если эта функция зависит от некоторого числа l параметров γ_i ($i = 1, 2, \dots, l$), то из требования стационарности функционала (7)

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \gamma_i} = 0 \quad (9)$$

получаются уравнения

$$\int \frac{\partial \varphi(x)}{\partial \gamma_i} [\nabla_y \varphi(x, b-0) - \nabla_y \varphi(x, b+0)] dx, \quad (10)$$

которое совместно с (8) определяют параметры λ и γ_i . Численное решение уравнений (8), (10) не вызывает принципиальных затруднений, и задача заключается в выборе $\varphi(x, b)$. Будем исходить из строгого разложения функции $\varphi(x, b)$ по некоторому полному ортонормированному базису $\varphi_k(x)$

$$\varphi(x, b) = \sum_k a_k \varphi_k(x).$$

Тогда вблизи границы $y = b$

$$\varphi(x, y) = \sum_k \varphi_k(x) \psi_k(y),$$

где

$$\psi_k(y) = \int \varphi(x, y) \varphi_k(x) dx.$$

Развивая эту простую идею, вместо уравнений (8), (10) приедем к однородной алгебраической системе бесконечного числа линейных уравнений относительно коэффициентов a_k . Равенство нулю детерминанта системы дает условие для нахождения параметра λ . При конкретных расчетах заданная точность вычисления λ определяет необходимое число уравнений из системы, причем это число зависит от выбора базисных функций $\varphi_k(x)$. Понятно, что с целью упрощения расчета число уравнений можно уменьшить без потери точности соответствующим выбором базиса $\varphi_k(x)$. Расчет предельно упрощается, если в разложении $\varphi(x, b)$ можно ограничиться одним слагаемым. Именно этот случай является предметом дальнейшего анализа. Положим

$$\varphi(x, b) = A\varphi(x). \quad (11)$$

Здесь A — постоянная величина, а функция $\varphi(x)$ нормирована на единицу. В соответствии с вышеизложенным для $\varphi(x, y)$ при $y \approx b$ имеем приближенное равенство

$$\varphi(x, y) = A\varphi(x)\psi(y), \quad (12)$$

где

$$A\psi(y) = \int \varphi(x, y) \varphi(x) dx, \quad \psi(b) = 1. \quad (13)$$

Теперь задача заключается в нахождении функций $\varphi(x)$, обеспечивающих наибольшую точность принятого приближения.

Уравнение относительно волновой функции на границе частичных областей

Математическая формулировка задачи об отыскании оптимальных функций $\varphi(x)$ может быть получена на основе вариационного принципа. Исходя из соображений простоты дальнейшего изложения, построим функционал

$$S = \iint \varphi(x, y) \left[\nabla_x^2 + \nabla_y^2 + \mu \varepsilon(x, y) - \lambda \right] \varphi(x, y) dx dy, \quad (14)$$

стационарный на решениях задачи (1) при условии, что вариация $\delta\lambda = 0$. Отметим, что уравнения (8), (10) могут быть получены из (14) так же, как из (7). Подынтегральная функция в (14) обращается в нуль во всех точках плоскости (x, y) , за исключением границ раздела $y = \pm b$, поскольку выражения (4), (5) удовлетворяют (1) в частичных областях. Выделим вблизи границы $y = b$ (см. рисунок, б) узкую (бесконечно узкую при $\Delta \rightarrow 0$) полоску. В пределах этой полоски функция $\varphi(x, y)$ определяется приближенным равенством (12), причем, как следует из (13), $\varphi(y)$ и ее первая производная непрерывны при $y = b$, поскольку таким же свойством обладает точное решение $\varphi(x, y)$. Теперь вместо (14) для рассматриваемой полоски можно записать

$$\frac{S}{\Delta} = \frac{1}{\Delta} \int dx \int_{b-\Delta}^{b+\alpha\Delta} dy \varphi(x) \psi(y) [\nabla_x^2 + \nabla_y^2 + \mu \varepsilon(x, y) - \lambda] \varphi(x) \psi(y). \quad (15)$$

Прежде чем перейти к отысканию условий, обеспечивающих экстремум функционала (15), отметим, что на границах полоски $y = b - \Delta$ и $y = b + \alpha\Delta$ ($\alpha \geq 0$) функция $\varphi(x, y)$ определяется выражениями (4), (5), удовлетворяющими уравнению (1). Это условие соответствует вариационной задаче с закрепленными концами. Поэтому для нахождения уравнений относительно искомых функций $\varphi(x)$ и $\varphi(y)$ будем считать, что при $y = b - \Delta$, $y = b + \alpha\Delta$ вариации $\delta\psi(y)$ и $\delta\nabla_y\psi(y)$ обращаются в нуль. Учитывая это обстоятельство и независимость вариаций $\delta\varphi(x)$ и $\delta\psi(y)$, из (15) при $\Delta \rightarrow 0$ получим

$$\left[\nabla_x^2 + \mu \frac{\varepsilon_2(x) + \alpha\varepsilon_1(x)}{1 + \alpha} + \frac{\nabla_y^2 \psi(b - 0) + \alpha \nabla_y^2 \psi(b + 0)}{\psi(b)(1 + \alpha)} \right] \varphi(x) = 0, \quad (16)$$

$$\left[\nabla_y^2 + \mu \int \varepsilon(x, y) \varphi^2(x) dx + \int \varphi(x) \nabla_x^2 \varphi(x) dx - \lambda \right] \varphi(y) = 0. \quad (17)$$

В выражениях (16), (17) учтено, что

$$\int \varphi^2(x) dx = (\varphi(x), \varphi(x)) = 1.$$

Аналогичный результат получается, если рассмотреть границу $y = -b$, что является следствием симметрии $\varepsilon(x, y) = \varepsilon(x, -y)$. Используя (17), уравнению (16) можно придать самосогласованный вид

$$\begin{aligned} & \left\{ \nabla_x^2 + \mu \frac{\varepsilon_2(x) + \alpha\varepsilon_1(x)}{1 + \alpha} - \right. \\ & \left. - \left[(\varphi(x), \nabla_x^2 \varphi(x)) + \mu \frac{(\varepsilon_2(x) + \alpha\varepsilon_1(x), \varphi^2(x))}{1 + \alpha} \right] \right\} \varphi(x) = 0. \end{aligned} \quad (18)$$

Здесь член, стоящий в квадратных скобках, представляет собой выражение собственного значения задачи (18) через решение $\varphi(x)$. Поэтому (18) можно переписать иначе

$$\left\{ \nabla_x^2 + \mu \left[\varepsilon_1(x) + \gamma (\varepsilon_2(x) - \varepsilon_1(x)) \right] - u \right\} \varphi(x) = 0, \quad (19)$$

где $\gamma = (1 + \alpha)^{-1}$, $(0 \leq \gamma \leq 1)$.

Следовательно, функция $\varphi(x)$, обеспечивающая наилучшую точность принятого приближения, является собственной функцией самосопряженной задачи (19), которая индуцирует полный ортогональный набор базисных функций, обсуждавшийся выше.

Таким образом, рассматриваемая задача (1) сводится к нахождению решений уравнения (19), зависящих от параметра γ , и двух характеристических уравнений (8), (10) относительно λ и γ . Объем вычислений при решении трансцендентных уравнений типа (8), (10) существенно зависит от выбора нулевого приближения. В рамках изложенной выше методики существует возможность сформулировать характеристические уравнения в нулевом приближении, значительно более простые, чем (8), (10).

Характеристические уравнения в нулевом приближении

Учитывая определение $\varepsilon(x, y)$ запишем уравнение (17) в компактной форме

$$\left[\nabla_y^2 + \sigma \theta(1 - y/b) - \rho \right] \psi(y) = 0. \quad (20)$$

Здесь введены обозначения $\sigma = \mu(\varepsilon_2(x) - \varepsilon_1(x), \varphi^2(x))$, $\rho = \lambda - (\varphi(x), \nabla_x^2 \varphi(x)) - \mu(\varepsilon_1(x), \varphi^2(x))$, $\theta(1 - y/b) = 1$ при $y \leq b$, $\theta(1 - y/b) = 0$ при $y > b$. Теперь используем функционал (15), принимая во внимание, что на решениях уравнений (16), (17) или (19), (20) он обращается в нуль. Это позволяет из (15) с учетом (19), (20) получить явный вид собственного значения задачи (1)

$$\lambda = u + \rho - \sigma \gamma. \quad (21)$$

Возьмем выражение (21) в качестве исходного и зададимся целью отыскать четыре независимых уравнения относительно четырех параметров, стоящих в правой части (21). Решение уравнения (19) определяет зависимость

$$u = u(\gamma). \quad (22)$$

Для нахождения второго уравнения продифференцируем (19) по параметру γ , умножим на $\varphi(x)$ и проинтегрируем по всей области изменения x . В результате получим

$$\frac{\partial u}{\partial \gamma} = \mu \left(\varepsilon_2(x) - \varepsilon_1(x), \varphi^2(x) \right) = \sigma. \quad (23)$$

Теперь используем условие экстремума (9), при котором ищутся решения системы (8), (10). Дифференцируя (21) и учитывая (23), имеем

$$\frac{\partial u}{\partial \gamma} + \frac{\partial \rho}{\partial \gamma} - \sigma - \gamma \frac{\partial \sigma}{\partial \gamma} = \sigma + \frac{\partial \rho}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial \gamma} - \sigma - \gamma \frac{\partial \sigma}{\partial \gamma}.$$

Отсюда при $\partial \rho / \partial \gamma \neq 0$ следует

$$\frac{\partial \rho}{\partial \sigma} = \gamma. \quad (24)$$

Четвертое уравнение можно получить, решая (20) и учитывая, что $\psi(y)$ определяется выражением (13). Как видно из (4), при $|y| < b$ существуют независимые четные и нечетные по y решения. Поэтому в соответствии с (13) решения уравнения (20) обладают свойством $\psi(-y) = \pm \psi(y)$. Кроме того, в соответствии с (13) $\psi(b) = 1$. Этим требованиям удовлетворяют два независимых решения уравнения (20)

$$\psi_1(y) = \frac{\cos \sqrt{\sigma - \rho} y}{\cos \sqrt{\sigma - \rho} b}, \quad \psi_0 = \frac{\sin \sqrt{\sigma - \rho} y}{\sin \sqrt{\sigma - \rho} b}.$$

Для области $y > b$ функция $\psi(y)$ задается выражениями (5) и (13), из которых видно, что при экстраполяции $\psi(y)$ в область больших значений y величина $\psi(y) \rightarrow 0$. Этому условию при $\psi(b) = 1$ удовлетворяет единственное решение уравнения (20)

$$\psi(y) = \exp \left[-\sqrt{\rho} (y - b) \right].$$

Требование непрерывности функции $\nabla_y \psi(y)$ на границе $y = b$ приводит к уравнениям

$$\operatorname{tg} \sqrt{\sigma - \rho} b = \frac{\sqrt{\rho}}{\sqrt{\sigma - \rho}}, \quad \operatorname{ctg} \sqrt{\sigma - \rho} b = -\frac{\sqrt{\rho}}{\sqrt{\sigma - \rho}} \quad (25)$$

соответственно для четных и нечетных по y решений.

По сравнению с системой (8), (10) уравнения (22)–(25) значительно проще и их решения, например, для кусочно-постоянных $\varepsilon_1(x)$ и $\varepsilon_2(x)$, могут быть получены на микрокалькуляторе. Приемлемость описанного нулевого приближения для вычисления собственного значения λ подтверждается его тождественностью с вычислением λ методом самосогласованного поля, что устанавливается ниже.

Связь нулевого приближения с результатом метода самосогласованного поля

Метод самосогласованного поля [6,8] принято использовать для расчета многочастичных систем. Формально уравнение (1) можно рассматривать как двухчастичное, описывающее одномерное движение двух частиц: одной — вдоль оси $0x$, а другой — вдоль $0y$ с потенциалом

взаимодействия $\varepsilon(x, y)$. В соответствии с методом самосогласованного поля волновая функция двух частиц $\varphi(x, y)$ представляется в виде произведения волновых функций отдельных частиц

$$\varphi(x, y) = X(x)Y(y). \quad (26)$$

Здесь, как в предыдущих разделах, функция $\varphi(x, y)$ без нарушения общности предполагается действительной. Подставляя выражение (26) в функционал (14) или (7), из условия стационарности $\delta S = \delta\lambda = 0$ получается система интегродифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \left\{ \nabla_x^2 + \mu \left[\varepsilon_1(x) + \gamma \left(\varepsilon_2(x) - \varepsilon_1(x) \right) \right] - \bar{u} \right\} X(x) &= 0, \\ \left[\nabla_y^2 + \bar{\sigma} \theta(1 - y/b) \theta(1 + y/b) - \bar{\rho} \right] Y(y) &= 0, \end{aligned} \quad (27)$$

где

$$\bar{\gamma} = \int_{-b}^b Y^2 dy, \quad \bar{u} = \lambda - \int_{-\infty}^{\infty} Y \nabla_y^2 Y dy,$$

$$\bar{\sigma} = \mu \int X^2 (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) dx, \quad \bar{\rho} = \lambda - \int X \nabla_x^2 X dx - \mu \int X^2 \varepsilon_1 dx, \quad (28)$$

$\theta(z)$ — функция Хевисайда, $X(x)$ и $Y(y)$ нормированы на единицу.

Представление решения в виде (26) соответствует процедуре приближенного разделения переменных в уравнении (1), а использование вариационного принципа, приводящего (1) к системе (27), (28), обеспечивает оптимизацию этой процедуры. Поэтому описанный подход к решению уравнения (1) можно назвать методом оптимального разделения переменных [9]. Он применим и в случае трехмерного уравнения Шредингера с неразделяющимися переменными. Система интегродифференциальных уравнений (27), (28) может быть решена методом итераций [8, 10]. Однако в данном случае приемлем более простой путь решений. При условиях (27) функционал (14) равен нулю. Учитывая это и определение параметров (28), получаем выражение для собственного значения задачи (1) $\lambda = \bar{u} + \bar{\rho} - \bar{\gamma}\bar{\sigma}$, которое при заменах $\bar{u}, \bar{\rho}, \bar{\gamma}, \bar{\sigma} \rightarrow u, \rho, \gamma, \sigma$ совпадает с формулой (21). Функционал (7) дает тот же результат. Покажем теперь, что при указанных заменах параметры $\bar{u}, \bar{\rho}, \bar{\gamma}, \bar{\sigma}$ удовлетворяют уравнениям (22)–(25).

Как видно, уравнение (19) с точностью до обозначений совпадает с первым уравнением из (27), поэтому характеристическое уравнение, устанавливающее связь параметров \bar{u} и $\bar{\gamma}$, совпадает с (22). Далее, дифференцируя обе части первого равенства из (27) по $\bar{\gamma}$, умножая на $X(x)$ затем интегрируя по всей области переменной x и учитывая определение $\bar{\sigma}$, получим формулу (23). Аналогичная процедура со вторым уравнением из (27) приводит к выражению (24). Аналитические решения этого уравнения хорошо известны и параметры $\bar{\rho}, \bar{\sigma}$ для четных и нечетных по y решений связаны соотношениями (25). Следовательно, в рассматриваемом случае собственные значения задачи (1), вычисленные методом самосогласованного поля и в нулевом приближении, описанном в предыдущем разделе, совпадают.

Заключение

Изложенная методика сводит задачу (1) с потенциалом специального вида к одномерной задаче (19) и двум уравнениям (8), (10) относительно параметров λ и γ . Функция $\varphi(x)$, удовлетворяющая (19), при вычислениях λ и γ однозначно определяет коэффициенты разложения волновой функции (4), (5) в частичных областях. В упрощенном варианте, названном нулевым приближением, собственные значения λ находятся по формуле (21), где параметры u, ρ, γ, σ удовлетворяют системе уравнений (22)–(25). Вычисленные таким образом значения λ для различных состояний совпадают с соответствующими значениями, найденными методом самосогласованного поля.

В работах [3–5] для прямоугольной потенциальной ямы ($\varepsilon_1(x) \equiv 0$; $\varepsilon_2(x) = \text{const}$ при $|x| \leq a$, $\varepsilon_2(x) = 0$ при $|x| > a$) с отношением боковых сторон $b/a = 2$ представлены функциональные зависимости $\lambda/\mu = f(a\sqrt{\mu})$ для низших состояний, полученные численными методами. Расчет системы (22)–(25) на микрокалькуляторе показывает практически полное совпадение указанных зависимостей с результатами наиболее точного из известных метода [5].

Список литературы

- [1] Бреходских Л.М. Волны в слоистых средах. М.: Наука, 1973. 436 с.
- [2] Goell J.P. // Bell Syst. Techn. J. 1969. Vol. 48. N 9. P. 2133–2166.
- [3] Matsuhara M. // JOSA. 1973. Vol. 63. N 12. P. 1514–1517.
- [4] Гоэлл Дж. // Введение в интегральную оптику. М.: Мир, 1977. С. 60.
- [5] Eyges L., Giamino P., Winterstener P. // J. Opt. Soc. Amer. 1979. Vol. 69. N 9. P. 1226–1235.
- [6] Фок В.А. Начала квантовой механики. М.: Наука, 1976. 376 с.
- [7] Гончаренко А.М., Карпенко В.А., Могилевич В.Н. // ТМФ. 1991. Т. 88. № 1. С. 59–65.
- [8] Слэттер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. М.: Мир, 1978. 665 с.
- [9] Гончаренко А.М., Карпенко В.А., Могилевич В.Н., Сотский А.Б. // ДАН БССР. 1985. Т. 29. № 2. С. 127.
- [10] Даудов А.С. Квантовая механика. М.: Наука, 1963. 748 с.