Б.М. Ляшенко

ДВОСТОРОННЯ АПРОКСИМАЦІЯ ВЛАСНИХ ЗНАЧЕНЬ РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА З ПАРАМЕТРИЧНИМ ПОТЕНЦІАЛОМ, ЩО ЗМІНЮЄТЬСЯ ВІД ДВОЯМНОГО ДО ОДНОЯМНОГО ВИДУ

Для відшукання власних значень задачі, наведеної у назві роботи, застосований метод двосторонньої апроксимації їх відповідними власними значеннями допоміжних задач з крайовими умовами першого та другого роду в точках урізання області означення. Наведено числовий приклад.

Для дослідження тунельного ефекту викликає інтерес потенціал, який в залежності від вибору значення певного параметра приймає необхідний для даної моделі вид. Рівняння Шредінгера з потенціалом, запропонованим в [1], має вигляд:

$$u''(p,x)-(q(p,x)-\lambda)u(p,x)=0, \tag{1}$$

$$q(p,x)=4p/(p-t^2)^2\cdot\left((3p-2.5)t^4+(p^2-5p+3)t^2-0.5p^2+p\right), \tag{2}$$

$$t=th\left(\sqrt{2p}x\right),\ \ p\in(1,\infty),\ \ x\in(-\infty,\infty).$$

Потенціал (2) при різних значеннях параметра p =1,1; 2; 3,5; 5 наведено на рис.1.

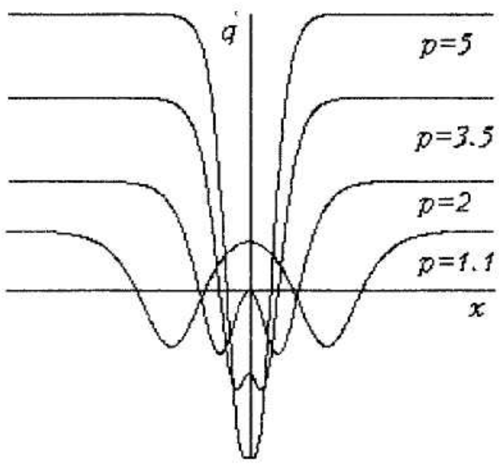

Рис. 1

При $p<5$ потенціал $q(p,x)$ має вигляд подвійної ями, а при $p\geq 5$ − простої.

Виходячи з парності функції $q(p,x)$ щодо змінної x, дослідження будемо проводити на півінтервалі $[0,\infty)$ з крайовою умовою:

$$u'(p,0)=0 \text{ для парних власних функцій;} \tag{3а}$$

$$u(p,0)=0 \text{ для непарних власних функцій} \tag{3б}$$

та умовою обмеженості власних функцій на нескінченності

$$|u(p,\infty)|<\infty. \tag{4}$$

Для розв'язування задачі (1)−(4) пропонується скористатися методом двосторонньої апроксимації [4] власних значень сингулярних задач, згідно з яким власні значення задачі (1)−(4) апроксимуються відповідними власними значеннями допоміжних несингулярних задач на відрізку $[0,\ d]$:

$$y''-q(p,x)y=\mu y, \tag{5}$$

$$y'(0)=0,\quad y(d)=0;$$

$$z''-q(p,x)z=\nu z, \tag{6}$$

$$z'(0)=0,\quad z'(d)=0.$$

При $q(p,x)-\lambda>0$ для $x\geq d$ мають місце нерівності $\nu\leq\lambda\leq\mu$.

Для чисельного розв'язування задач (6) і (5) застосуємо відповідно триточкові різницеву та варіаційно-різницеву схеми, що забезпечують наближення знизу і зверху до власних значень відповідної задачі. Отож, маємо

$$\nu_k^h \le \lambda_k^h \le \mu_k^h. \tag{7}$$

Побудуємо розрахункові різницеві схеми для розв'язування задачі (1)–(4). Для цього введемо різницеву сітку $\omega_h = \{x_0 = 0, \quad h = (d-c)/n, \quad x_{i+1} = x_i + h, \quad i = \overline{0,n-1}, \quad x_n = d\}$ і такі позначення $q_i = q(p, x_i)$, $y_i = y(x_i)$, $z_i = z(x_i)$.

Варіаційно-різницева схема другого порядку точності для задачі (5) має вигляд:

$$\left(1 - \frac{h^2}{6}(q_i - \mu^h)\right) y_{i-1} + \left(-2 - \frac{2}{3}h^2(q_i - \mu^h)\right) y_i + \left(1 - \frac{h^2}{6}(q_i - \mu^h)\right) y_{i+1} = 0, \tag{8}$$

$$y_0 = 0 \text{ або } y_1 = y_0\left(1 + \frac{h^2}{2}(q_0 - \mu^h)\right) \quad \text{для} \quad q_0' \ge 0, \quad y_n = 0.$$

Різницева схема другого порядку точності для задачі (6) приймає вид:

$$z_{i-1} + \left(-2 - h^2(q_i - \nu^h)\right) z_i + z_{i+1} = 0, \tag{9}$$

$$z_0 = 0 \text{ або } z_1 = z_0\left(1 + \frac{h^2}{2}(q_0 - \nu^h)\right), \quad z_{n-1} = z_n\left(1 + \frac{h^2}{2}(q_n - \nu^h)\right).$$

Точку $x = d$ урізання області означення задачі обираємо так, щоб отримана похибка двосторонньої апроксимації не перевищувала заданої точності щодо шуканих власних значень $\mu_k - \nu_k \le 2 \cdot \varepsilon$, де ε – задана точність.

Застосуємо побудовані розрахункові схеми (8),(9) до розв'язування задачі (1)–(4). Відшукання власних значень здійснимо за допомогою пакета прикладних програм SPECTRUM [3]. В табл. 1 наведено результати, що ілюструють залежність власних значень апроксимуючих задач (8),(9) при кроці різницевої сітки h = 0,002 та деяких значеннях параметра $p = 2$; 5; 8 від вибору точки $x = d$ урізання області означення сингулярної задачі (1)–(4).

Таблиця 1

P	d=	4	5	6	7	8
2	ν_1	2.818121	2.820881	2.821206	2.821242	2.821246
	μ_1	2.831253	2.821253	2.821253	2.821253	2.821252
5	ν_1	9.414217	9.420920	9.422428	9.422762	9.422835
	μ_1	9.422903	9.422875	9.422874	9.422874	9.422874
8	ν_1	15.59976	15.60995	15.61245	15.61332	15.61358
	μ_1	15.61384	15.61372	15.61371	15.61371	15.61371

Таблиця 2

h	ν_1	μ_1
0.1	2.8137139	2.8286595
0.05	2.8193431	2.8231100
0.01	2.8211343	2.8213242
0.005	2.8211902	2.8212683
0.001	2.8212083	2.8212509
0.0005	2.8212090	2.8212506

Таблиця 3

p	λ_1	p	λ_1	p	λ_1	p	λ_1
1.1	0.36034	2.2	3.30141	4.2	7.73419	6.2	11.91836
1.2	0.68251	2.4	3.77045	4.4	8.15888	6.4	12.33124
1.3	0.98352	2.6	4.23072	4.6	8.58177	6.6	12.74344
1.4	1.26995	2.8	4.68388	4.8	9.00303	6.8	13.15501
1.5	1.54545	3.0	5.13119	5.0	9.42285	7.0	13.56604
1.6	1.81239	3.2	5.57361	5.2	9.84137	7.2	13.97645
1.7	2.07238	3.4	6.01191	5.4	10.25871	7.4	14.38643
1.8	2.32662	3.6	6.44667	5.6	10.67499	7.6	14.79592
1.9	2.57601	3.8	6.87838	5.8	11.09030	7.8	15.20551
2.0	2.82125	4.0	7.30744	6.0	11.50473	8.0	15.61363

В табл. 2 показано залежність обчислених власних значень різницевих задач (8),(9) від вибору величини кроку скінченно-різницевої сітки (при $p = 2$, $d = 6$).

Виходячи з результатів, наведених у табл. 1, 2 та заданої точності $\varepsilon = 10^{-5}$ шуканих власних значень сингулярної задачі, для подальших розрахунків оберемо $d = 8$ та $h = 0.005$. Отримані власні значення задачі (1)–(3) при різних значеннях параметра p наведено в табл. 3.

Отримані числові результати добре узгоджуються з результатами досліджень інших авторів [1].

Як видно з наведених таблиць, метод двосторонньої апроксимації власних значень сингулярних задач є надійним засобом дослідження спектральних задач квантової механіки.

ЛІТЕРАТУРА:

1. *Hudak O., Trlifaj L.* Exact bound-state wavefunctions for potential varying from the double well to the single well // J. Phys. A: Math. Gen., 1985. – V. 18. – № 3. – P. 445–453.
2. *Ляшенко Б.Н.* Методы решения сингулярных задач Штурма-Лиувилля. – К.: Либідь, 1991. – 126 с.
3. *Ляшенко Б.М.* Пакет прикладних програм (ППП) для розв'язування сингулярних спектральних задач теоретичної фізики // Вісник ЖІТІ, 1997. – № 6. – С. 183–189.

ЛЯШЕНКО Борис Миколайович – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри математики Житомирського державного педагогічного інституту ім. І.Я. Франка.

Наукові інтереси:

– математичне моделювання і обчислювальні методи;

– інформатика.