

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Национальный исследовательский университет

Программа повышение конкурентоспособности ННГУ им. Н.И. Лобачевского

Стратегическая инициатива 7 «Достижение лидирующих позиций в области суперкомпьютерных технологий и высокопроизводительных вычислений»

Основная образовательная программа

011200 «Физика» общий профиль, квалификация (степень) бакалавр

Форма обучения:

Очная

Учебно-методическая разработка по дисциплине

"Квантовая механика"

А.М.Сатанин

**ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ГЛАВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ: МЕТОДЫ
РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ**

Мероприятие 7.1.1. Разработка образовательных программ подготовки, переподготовки и повышения квалификации кадров в области суперкомпьютерных технологий и высокопроизводительных вычислений

Нижний Новгород
2014 год

Аннотация

к методической работе: **«ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ГЛАВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ: МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫСОКОПРИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ»;**

автор: Сатанин А.М.

Пособие посвящено изложению численного метода решения одномерного уравнения Шредингера. На основе вариационного принципа сформулировано интегральное соотношение, позволяющее получить разностные схемы для уравнения Шредингера с любой наперед заданной точностью. Дана физическая интерпретация разностного уравнения, приведены примеры решений уравнения на решетке, прослежена связь с непрерывным пределом. Показано как можно решить разностное уравнение для произвольного потенциала стандартными методами линейной алгебры. Приведена программа численного расчета энергетических уровней, которая тестируется на примере ряда точно решаемых моделей. Разработана параллельная версия метода прогонки для вычисления коэффициентов отражения и прохождения сквозь крупномасштабные наноструктуры. Разработан алгоритм блочной прогонки, позволяющий моделировать двумерные и трехмерные структуры. Сформулированы упражнения для самостоятельного решения.

Данное пособие предназначено для студентов старших курсов физического факультета ННГУ, обучающихся по направлениям подготовки 011200 "Физика"

ОГЛАВЛЕНИЕ		
	ВВЕДЕНИЕ	4
1.	Разностное уравнение Шредингера.....	8
1.1	Вариационный принцип.....	8
1.2	Аналитические методы решения разностного уравнения Шредингера на решетке	13
1.2.1	Свободная частицы на решетке.....	13
1.2.2	Задача рассеяния на точечном потенциале.....	14
1.2.3	Связанные состояния	15
1.3	Матричный метод решения уравнения Шредингера в среде <i>Mathematica</i>	16
1.4	Задачи для самостоятельного решения.....	21
2	Задача рассеяния. Последовательная версия.....	22
2.1	Задача рассеяния в одномерном.....	22
2.2	S-матрица.....	25
2.3	Внутренняя задача.....	27
2.4	Пример аналитического решения внутренней задачи.....	28
2.5	Метод численного решения внутренней задачи.....	30
2.6	Численный алгоритм.....	33
2.7	Программы в среде <i>Mathematica</i>	34
2.8	Вопросы и задания	37
3	Задача рассеяния. Параллельная версия	39
3.1	Идея распараллеливания задачи рассеяния	40
3.2	Блочное разбиение	41
3.3	Алгоритм решения с использованием параллельной версии	43
3.4	Алгоритм решения двумерного уравнения Шредингера	43
3.5	Задачи для самостоятельного решения	54
	КРАТКИЕ ВЫВОДЫ	55
	СПИСОК ЦИТИРУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ	56

ВВЕДЕНИЕ

Согласно основным положениям квантовой механики поведение электронов в пространстве и времени описываются комплексной волновой функцией, зависящей от времени и пространственных координат $\Psi(\vec{r}, t)$ (спиновая степень свободы в нерелятивистском случае выделяется в виде множителя и может рассматриваться независимо). Поскольку квадрат модуля волновой функции ассоциируется с плотностью вероятности, волновая функция должна быть нормируема условием:

$$\int \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r} = 1. \quad (1.1)$$

Предполагается, что в начальный момент времени приготовлено начальное состояние частицы $\Psi(\vec{r}, 0)$. Тогда эволюция во времени волновой функции $\Psi(\vec{r}, t)$ нерелятивистской частицы описывается временным уравнением Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t), \quad (1.2)$$

где

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad -$$

- оператор Гамильтона, а $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ - оператор импульса. Если потенциальное поле стационарно, $\frac{\partial V}{\partial t} = 0$, то временная зависимость волновой функции выражается фазовым множителем:

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(\vec{r}), \quad (1.3)$$

где функция $\psi(\vec{r})$ подчиняется стационарному уравнению Шредингера:

$$\left\{ \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right\} \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (1.4)$$

Согласно правилам квантовой механики параметр E , возникающий при разделении переменных, следует интерпретировать как разрешенную энергию частицы. Решение уравнения (1.4) позволяет найти собственные функции и разрешенные значения энергии. Отметим, что условие нормируемости (конечности волновой функции), играет решающую роль при поиске собственных функций.

Дальнейшее упрощение возможно, когда потенциал представляется в виде суммы функций от независимых (различных) координат. В этом случае волновая функция электрона может быть записана в виде произведения функций от соответствующих независимых переменных. Для каждого множителя имеет место одномерное уравнение Шредингера. Например, состояния частицы, движущейся вдоль оси x , подчиняются уравнению:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad (1.5)$$

где теперь

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$

Волновая функция $\psi(x)$ должна быть нормируема условием

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (1.6)$$

Как правило, потенциал $V(x)$, в котором движется частица, ограничен или быстро убывает при удалении от некоторого выделенного центра

событий (начала отсчета). При этом классическое движение в зависимости от энергии частицы может быть либо ограниченным – финитным; либо неограниченным – инфинитным. В квантовой механике в случае финитного классического движения возможно существование нормируемых решений, которым соответствует дискретный спектр энергии. Инфинитному движению сопоставляется волновой пакет и формулируется задача рассеяния.

Известно, что общее решение дифференциального уравнения второго порядка есть линейная комбинация двух фундаментальных решений. Причем, явный вид решений уравнения

действия и выбор переменных совершенно другой. Действие введем выражением:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0 \quad (1.7)$$

можно построить только для узкого класса потенциалов. Свойство принадлежности к таким классам, для которых удастся выписать явное решение (в терминах элементарных или специальных функций), целиком определяется типом особых точек коэффициентов дифференциального уравнения второго порядка, фактически, видом потенциала $V(x)$ [см. В.И.Смирнов, Курс высшей математики, т. 3]. Например, если при продолжении в комплексную плоскость переменных коэффициенты эти особенности сводятся к трем простым полюсам, - уравнения класса Фукса - то решения выражаются через гипергеометрические функции. Типы дифференциальных уравнений, решения которых могут быть выписаны в явном виде, весьма ограничены, причем, даже если такие функции и выписаны, скажем, в виде гипергеометрических функций, то анализ таких решений, а также часто возникающая необходимость расчета матричных элементов наблюдаемых практически трудно реализуемы в явном виде. Современные компьютерные методы позволяют получить численное

решение одномерного уравнения Шредингера для любого класса потенциальных функций. В настоящее время разработано множество численных процедур решения (1.4). К таковым можно отнести:

1) методы, основанные на разложении решений уравнения (1.6) по определенным базисным функциям ;

2) методы, основанные на использовании осцилляционной теоремы (метод фазовых функций);

3) методы, основанные на свойствах решения задачи Штурма-Лиувилля (метод Уилкинсона);

4) итерационные методы численного решения уравнения Шредингера.

В первом разделе излагается простейший подход, базирующийся на использовании для решения уравнения Шредингера стандартных методов линейной алгебры. И хотя в этом разделе для дальнейшего решения задачи на собственные функции и собственные значения используются только библиотечные программы, в этом разделе изложены полезные для студента 3-го года обучения дополнительные факты, которые слабо отражены в учебной литературе. Во-первых, приведен вывод разностной схемы с любой точностью. Во-вторых, продемонстрирована связь дискретных и непрерывных подходов (что необходимо для интерпретации и тестирования программ). Наконец, в пособии приведены примеры численного решения уравнения Шредингера для различных потенциалов и дана интерпретация полученных результатов.

Второй раздел посвящен разработке алгоритма численного решения уравнения Шредингера на решетке. В этом разделе излагается метод, который базируется на сведении уравнения второго порядка к уравнению первого порядка - уравнению Риккати. Данное уравнение решается методом прямой и обратной прогонки.

В третьем разделе излагается параллельная версия задачи рассеяния. Сначала описывается физическая идея распараллеливания уравнения Шредингера. Показано, что метод, описанный в разделе 2 допускает блочное разбиение. Предложен алгоритм решения задачи рассеяния на многопроцессорном комплексе.

1. Разностное уравнение Шредингера

Вернемся теперь к более детальному анализу одномерного уравнения Шредингера (1.4). Как мы объяснили выше, частица, движущаяся в одномерном стационарном потенциале, описывается волновой функцией, зависящей от одной пространственной переменной.

Прежде всего, покажем, что уравнение Шредингера может быть получено из вариационного принципа. Для этого составим функционал, варьируя который мы получим уравнение (8). Напомним, что функционал – это число, сопоставляемое функции по определенному правилу. Например, в классической механике вводится действие, сопоставляемое траектории частицы по следующему правилу: составляется интеграл по времени от функции Лагранжа (которая есть разность кинетической и потенциальной энергии частицы). При этом действие вычисляется как интеграл по времени от функции Лагранжа, зависящей от любой мыслимой (виртуальной или варьируемой) траектории. В классической механике требование экстремальности действия определяет истинную траекторию движения.

1.1. Вариационный принцип

В квантовой механике можно действовать по аналогии, однако, конструирование действия и выбор переменных совершенно другой. Действие введем выражением:

$$S[\psi, \psi^*] = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{H} \psi dx - E \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx \quad (1.8)$$

Кратко поясним мотивацию выбора такого функционала. Первое слагаемое представляет собой среднюю энергию частицы, а второе введено таким образом, чтобы освободиться от «связи» (1.8). В данном контексте параметр E играет роль множителя Лагранжа.

Объясним смысл варьирования действия (1.8). Пусть имеется некоторая произвольно выбранная («пробная») волновая функция $\psi(x)$. Для нее можно вычислить интеграл согласно (1.8). Рассмотрим бесконечно близкую к $\psi(x)$ функцию: $\psi(x) + \delta\psi(x)$, где приращение $\delta\psi(x)$ определено в каждой точке области определения. Составляем теперь разность:

$$\delta S = S[\psi + \delta\psi, \psi^* + \delta\psi^*] - S[\psi, \psi^*]. \quad (1.9)$$

Поскольку мы освободились от связи (1.2), то вариации $\delta\psi(x)$ и $\delta\psi^*(x)$ можно рассматривать как независимые! Удерживая в выражении (1.9) только линейные по малым вариациям $\delta\psi(x)$ и $\delta\psi^*(x)$ слагаемые и принимая во внимание (1.9), перепишем (1.10) в виде:

$$\delta S = \int_{-\infty}^{\infty} \delta\psi^* (\hat{H} - E)\psi dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\hat{H} - E)\delta\psi dx. \quad (1.10)$$

Согласно основной лемме вариационного исчисления равенство $\delta S = 0$ возможно для произвольных $\delta\psi(x)$ и $\delta\psi^*(x)$ при условиях

$$\hat{H}\psi = E\psi \text{ и } \hat{H}\psi^* = E\psi^*. \quad (1.11)$$

При этом мы использовали свойство самосопряженности оператора Гамильтона.

Таким образом, показано, что уравнение Шредингера (1.11) может быть получено из вариационного принципа.

С учетом самосопряженности оператора импульса, выражение для действия (1.10) записывается в эквивалентной форме:

$$S[\psi, \psi^*] = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 + (V(x) - E) |\psi(x)|^2 \right\} dx. \quad (1.12)$$

Представим себе теперь дискретное множество точек, в которых задана волновая функция: $\psi_n \equiv \psi(x_n)$, где $x_n = \Delta x \cdot n$ (см. Рис. 1). Отметим, что величину $|\psi_n|^2 \Delta x$ можно интерпретировать как вероятность нахождения частицы в интервале Δx (отнесенную к узлу с номером n).

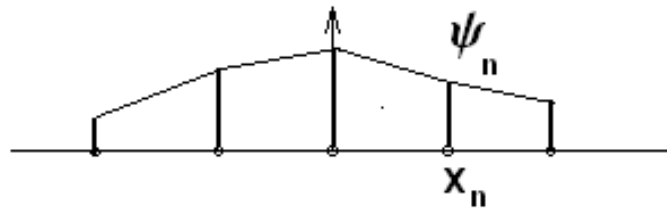


Рис. 1.1. Волновая функция задана на дискретном множестве точек

В промежуточных точках волновую функцию можно получить путем интерполяции с любой наперед заданной точностью. В простейшем случае можно записать:

$$\psi(x) = \psi_n + (\psi_{n+1} - \psi_n) \left(\frac{x - x_n}{\Delta x} \right). \quad (1.13)$$

Учитывая (1.13) и вспоминая определение интеграла как предел суммы (Риманов интеграл), перепишем (1.12) в виде:

$$S[\psi, \psi^*] = \sum_n \Delta x \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{\Delta x} \right|^2 + (V(x_n) - E) |\psi_n|^2 \right\}, \quad (1.14)$$

где сумма пробегает по всем узлам решетки, на которых задана волновая функция. Отметим, что на этом языке аппроксимируя волновую функцию с большей точностью, например, по “трем точкам” - параболой, - а также увеличивая точность аппроксимации подынтегрального выражения, можно получить более точное выражения для функционала S (см. упражнение [5]).

Поскольку функционал S (1.14) теперь зависит от счетного числа переменных, то варьирование фактически сводится к вычислению производных по ψ_n . Варьируя функционал S , получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n}{\Delta x^2} \right) + V_n \psi_n = E \psi_n \quad (1.15)$$

где $V_n \equiv V(x_n)$. Вводя обозначения:

$$v_n = \frac{2m\Delta x^2}{\hbar^2} V_n \quad \text{и} \quad \varepsilon = \frac{2m\Delta x^2}{\hbar^2} E,$$

уравнение (1.15) удобно переписать в безразмерном виде:

$$-(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) + (2 + v_n)\psi_n = \varepsilon \psi_n. \quad (1.16)$$

Пусть нас интересуют энергетические уровни частицы в потенциальной яме. Поместим систему в глубокий “ящик” (бесконечно глубокую яму, стенки которой достаточно удалены от актуальной области движения) (Рис. 2). Ввиду сильного убывания волновые функции локализованных состояний слабо чувствуют стенки вспомогательной ямы.

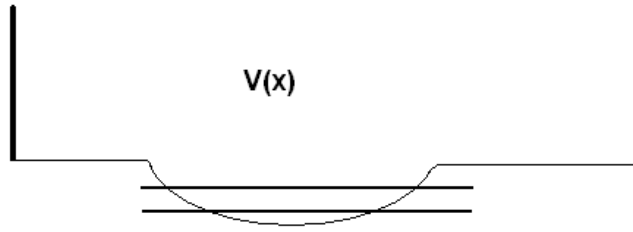


Рис. 1.2. Вспомогательный “ящик”, который вводится, чтобы задать “нулевые” граничные условия на его стенках.

Положение левой стенки примем за начало координаты $x: x_0 = 0$, а правой - $x_{N+1} = L$. В граничных точках ($x_0 = 0$ и $x_{N+1} = L$) волновую функцию положим равной нулю. Задавая $n = 0, 1, 2, \dots, N+1$, мы можем расписать систему уравнений (18) в виде:

$$\begin{aligned}
 (2 + v_1)\psi_1 - \psi_2 &= \varepsilon\psi_1, \\
 -\psi_1 + (2 + v_2)\psi_2 - \psi_3 &= \varepsilon\psi_2, \\
 &\dots \\
 -\psi_{n-1} + (2 + v_n)\psi_n - \psi_{n+1} &= \varepsilon\psi_n, \\
 &\dots \\
 -\psi_{N-2} + (2 + v_{N-1})\psi_{N-1} - \psi_N &= \varepsilon\psi_{N-1}, \\
 -\psi_{N-1} + (2 + v_N)\psi_N &= \varepsilon\psi_N.
 \end{aligned} \tag{1.17}$$

Или в матричном виде:

$$\begin{pmatrix}
 2+v_1 & -1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\
 -1 & 2+v_2 & -1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\
 0 & -1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 \cdot & \cdot & \cdot & 2+v_n & \cdot & \cdot & \cdot \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 2+v_{N-1} & -1 \\
 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -1 & 2+v_N
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 \psi_1 \\
 \psi_2 \\
 \cdot \\
 \psi_n \\
 \cdot \\
 \psi_{N-1} \\
 \psi_N
 \end{pmatrix}
 = \varepsilon
 \begin{pmatrix}
 \psi_1 \\
 \psi_2 \\
 \cdot \\
 \psi_n \\
 \cdot \\
 \psi_{N-1} \\
 \psi_N
 \end{pmatrix}. \tag{1.18}$$

В левой части стоит матрица H (размерности $N \times N$), которая изображает гамильтониан системы; она действует на N -мерный вектор-столбец ψ . Следовательно, матричное уравнение Шредингера записывается в виде:

$$H\psi = \varepsilon\psi. \quad (1.19)$$

Таким образом, задача о решении дискретного уравнения Шредингера сведена к хорошо разработанной задаче линейной алгебры – задаче на собственные функции и собственные значения.

1.2. Аналитические методы решения разностного уравнения Шредингера

Прежде чем обсуждать численные методы решения (1.18) рассмотрим аналитические решения уравнения (1.18) для нескольких простейших случаев.

1.2.1 Свободная частицы на решетке

Рассмотрим свободное движение электрона по одномерной бесконечной решетке. При $v_n = 0$ решение уравнения

$$-(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) + 2\psi_n = \varepsilon\psi_n. \quad (1.20)$$

ищем в виде: $\psi_n = Ae^{ik\Delta xn}$. Из (1.20) получаем, что решение существует при:

$$E = \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2}(1 - \cos(k\Delta x)). \quad (1.21)$$

Как видно из (1.21), при $k\Delta x \ll 1$

$$E \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m} . \quad (1.22)$$

что соответствует связи между энергией и импульсом – дисперсионному соотношению - в непрерывном пределе. Величина k^{-1} пропорциональна длине волны частицы λ , поэтому неравенство $\Delta x \ll \lambda$ означает, что в том случае, когда длина волны частицы много больше постоянной решетки, частица на решетке не замечает дискретность пространства, т.е. движется по решетке словно в “непрерывной среде”.

Если же параметр $k\Delta x$ не слишком мал, то (1.21) отличается от (1.21) даже при больших длинах волн:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(1 - \frac{(k\Delta x)^2}{12} + \dots\right) . \quad (1.23)$$

Отсюда следует, что соответствие между дискретной и непрерывной моделями выполняется только при достаточно малом шаге решетки.

1.2.2. Задача рассеяния на точечном потенциале

Рассмотрим точечное препятствие, положение которого свяжем с началом координат:

$$v_0 = \frac{2m\Delta x^2}{\hbar^2} V_0 . \quad (1.24)$$

В данном случае удобно сместить начало координат к положению точечного потенциала и считать решетку бесконечной: $-\infty < n < \infty$.

При $n \neq 0$ решение выбираем в виде:

$$\begin{cases} \psi_n = e^{ik\Delta xn} + re^{-ik\Delta xn}, & n < 0, \\ \psi_n = te^{ik\Delta xn}, & n > 0. \end{cases} \quad (1.25)$$

Из (1.17) имеем:

$$\begin{cases} -(\psi_{-2} + \psi_0) + 2\psi_{-1} = \varepsilon\psi_{-1}, \\ -(\psi_{-1} + \psi_1) + (2 + v_0)\psi_0 = \varepsilon\psi_0, \\ -(\psi_1 + \psi_0) + 2\psi_1 = \varepsilon\psi_1. \end{cases} \quad (1.26)$$

Уравнения (1.26) играют роль условий сшивки волновой функции.

Подставив в (1.26) выражение (1.25), найдем для амплитуды прохождения:

$$t = \frac{i \sin(k\Delta x)}{-i \sin(k\Delta x) + v_0}. \quad (1.27)$$

Нетрудно видеть, что при $k\Delta x \ll 1$ выражение для амплитуды рассеяния согласуется с известным решением для задачи рассеяния частицы на короткодействующем потенциале:

$$t = \frac{ik}{-ik + \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}}. \quad (1.28)$$

1.2.3 Связанные состояния

Будем искать решение, соответствующее связанному состоянию частицы с энергией $E < 0$. Из (1.17) и из того факта, что на узлах решетки, не “захватывающих” потенциал, волновая функция подчиняется (1.25), мы можем заключить, что решения с $E < 0$, убывающие на больших расстояниях для притягивающего потенциала $V_0 < 0$, возможны только при мнимых k : $k = -i|k|$, когда может иметь место

$$E = -\frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} (ch(|k|\Delta x) - 1). \quad (1.29)$$

Убедимся, что такое решение существует. Взяв решения при $n \neq 0$ в вида:

$$\begin{cases} \psi_n = Ae^{k|\Delta xn}, & n < 0, \\ \psi_n = Be^{-k|\Delta xn}, & n > 0, \end{cases} \quad (1.30)$$

мы найдем из (1.26):

$$E = -\frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} \left(\sqrt{1+v_0^2} - 1 \right). \quad (1.32)$$

При малых $v_0 \ll 1$ это решение переходит в известное решение для точечного потенциала:

$$E = -\frac{\hbar^2 v_0^2}{2m\Delta x^2}, \quad (1.33)$$

а в пределе сильно связи: $v_0 \gg 1$

$$E = -\frac{\hbar^2 v_0}{m\Delta x^2}. \quad (1.34)$$

1.3. Матричный метод решения уравнения Шредингера в среде *Mathematica*

А) Формирование матрицы гамильтониана. Сначала рассматривается свободное движение ($V = 0$):

```

size=20;
(* Matrix h *)
v[n_]:=Module[{},0];
hs={};
h={};
Do[AppendTo[hs,0],{n,1,size}];
Do[AppendTo[h,hs],{n,1,size}];
Do[h[[n,n+1]]=-1.,{n,1,size-1}];
Do[h[[n+1,n]]=-1.,{n,1,size-1}];

```



```
Do[h[[n,n]]=2+ v[n,{n,1,size}];
```

```
h//MatrixForm
```

Пример матрицы гамильтониана для 20 узлов:

```
{ 2 -1. 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-1. 2 -1. 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 -1. 2 -1. 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 -1. 2 -1. 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 -1. 2 -1. 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 -1. 2 -1. 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 -1. 2 -1. 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 -1. 2 -1. 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 -1. 2 -1. 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 -1. 2 -1. 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1. 2 -1. 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1. 2 -1. 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1. 2 -1. 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1. 2 -1. 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1. 2 -1. 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1. 2 -1. 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1. 2 -1.
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1. 2 }
```

Стандартная программа Eigensystem[h] , позволяет отыскать список собственных значений eig (список) и соответствующих функций eve (список).

```
{eig,eve}=Eigensystem[h];
```

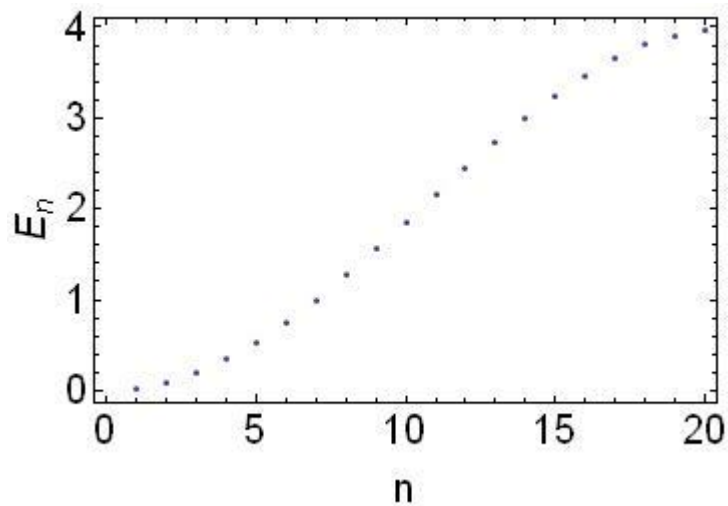
Пример списка из 20 уровней:

```
eig=
```

```
{3.97766,3.91115,3.80194,3.65248,3.4661,3.24698,3.,2.73068,2.44504,2.14946,1.85054,1.55496,1.26932,1.,0.75302,0.533896,0.347522,0.198062,0.0888544,0.0223383}
```

Зависимость собственного значения от его номера:

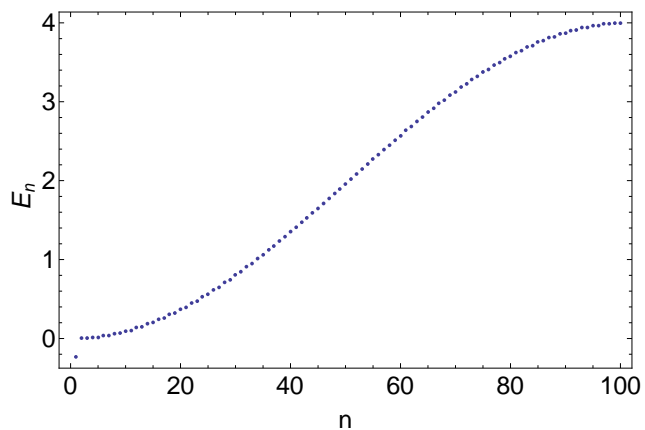
```
ListPlot[Sort[eig],Frame->True,BaseStyle->{FontFamily->"Helvetica",FontSize->20},FrameLabel->{" n "," En "}]
```



Пример существования локального уровня:

size=100;

v[n_]:=Module[{},If[n<50,-1]];

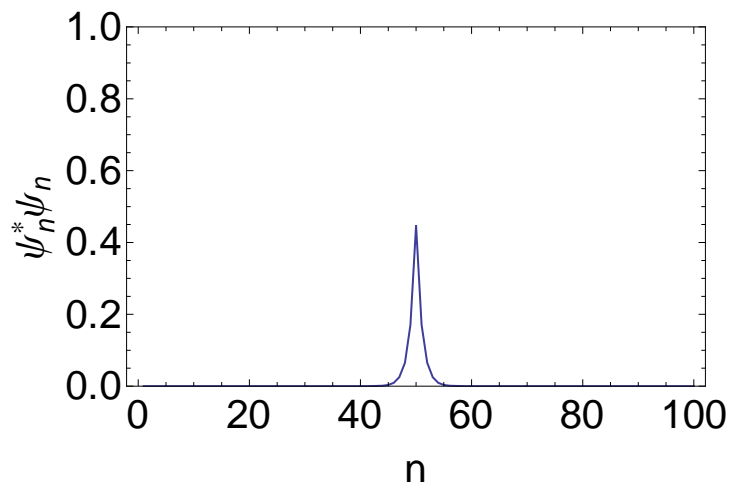


E= -0.236068

ListPlot[eve[[86]]*eve[[86]],Frame<True,

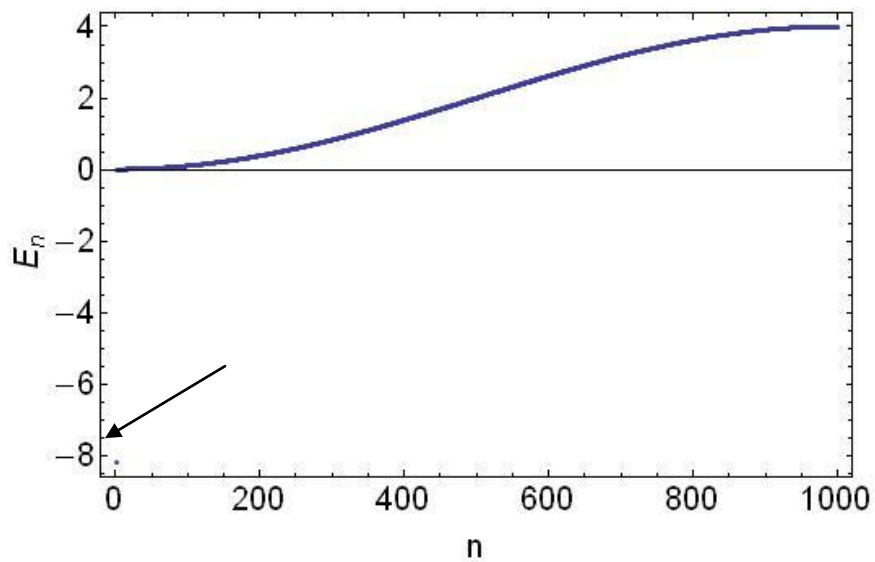
PlotRange<{0,1},BaseStyle->{FontFamily->"Helvetica",FontSize<20},

FrameLabel< {" n ", " ψ_n^* n " },Joined<True]



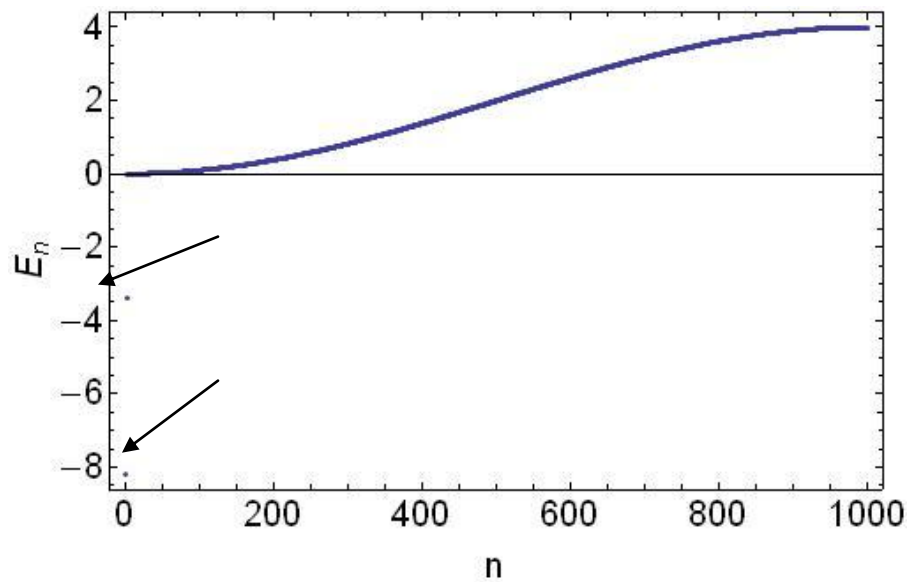
size=1000;

v[n_]:=Module[{},If[n==500,-5,If[n<6,0,0]]];



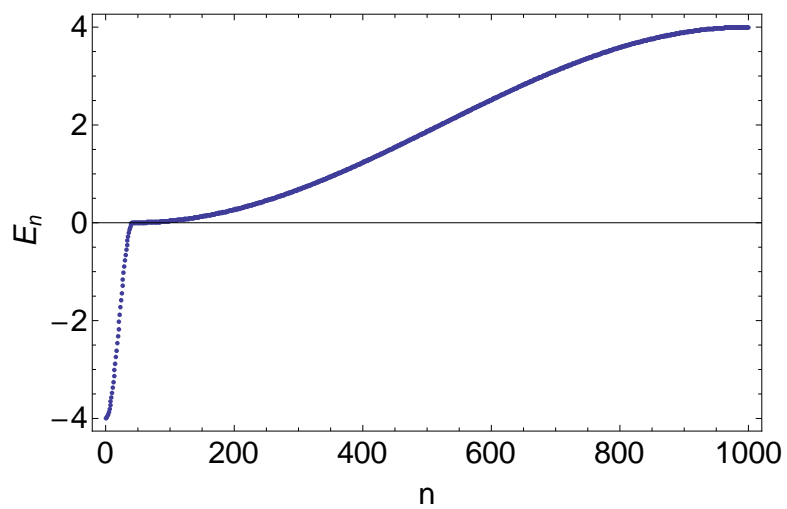
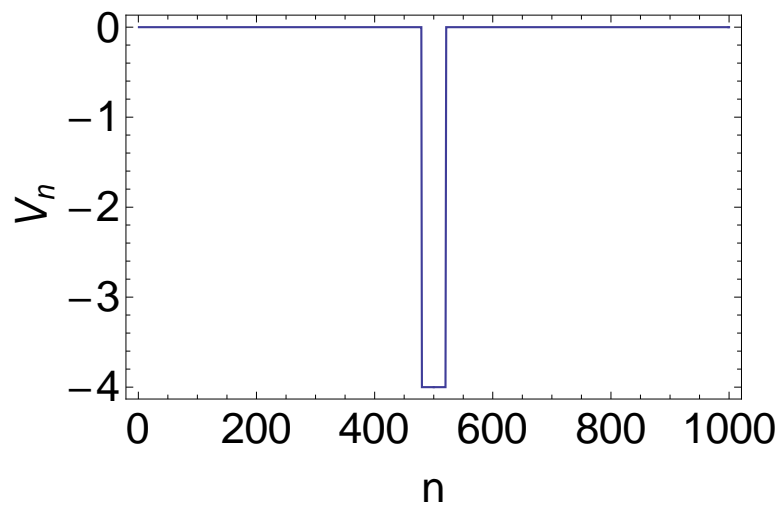
Пример существования двух локальных уровней:

v[n_]:=Module[{},If[n<450,-10,If[n<550,-5,0]]];



Пример формирования уровней в потенциальной яме:

`v[n_]:=Module[{},If[Abs[n-500]<=20,4.0,0]];`



1.4. Задачи для самостоятельного решения

1. Найти численно волновые функции и разрешенные значения энергии частицы в потенциальных полях:

а) $V(x) = \lambda|x|^{2n}$, для любого заданного $n > 1$; б) $V(x) = -\frac{V_0}{ch^2(x/a)}$;

в) $V(x) = -\frac{\lambda}{|x|^{2n}}$, для любого заданного $n < 1$; г) $V(x) = V_0\left(\frac{x}{a} - \frac{a}{x}\right)^2$.

д) $V(x) = A(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x})$.

2. Рассмотреть движение электрона в магнитном поле вблизи поверхности полупроводника (считать работу выхода бесконечно большой).
3. Найти уровни энергии электрона в инверсионном слое, моделируя потенциал выражением:

$$V(x) = \begin{cases} \alpha x, & x > 0, \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

Решение задачи можно получить точно, выразив волновую функцию через функцию Эйри. Выполнить численный анализ и сравнить результат с аналитическим.

4. Разработать разностную схему численного решения уравнения Шредингера в импульсном представлении.
5. Получить матричное уравнение Шредингера для периодических граничных условий (иными словами, получить обобщение (1.18)).

2. Задача рассеяния в квантовой механике. Последовательная версия

В экспериментах по рассеянию частицы, испущенные источниками, налетают на мишень, а затем, после взаимодействия с мишенью, детектируются приборами, расположенными на больших расстояниях от рассеивателя. Для описания процессов рассеяния необходимо решить уравнение Шредингера с соответствующими граничными условиями. В данном разделе мы обсудим, как внешняя задача может быть сведена к внутренней краевой задаче с комплексными граничными условиями. Мы разовьем численный метод решения этой задачи.

2.1. Задача рассеяния в одномерном случае

Рассмотрим свободную частицу, движущуюся в одном измерении. Ее гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}. \quad (2.1)$$

Оператор импульса $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ коммутирует с \hat{H}_0 , и потому эти операторы имеют общую базисную функцию. Их собственными функциями будут плоские волны

$$\psi(x) = A^\pm e^{\pm ipx/\hbar}. \quad (2.2)$$

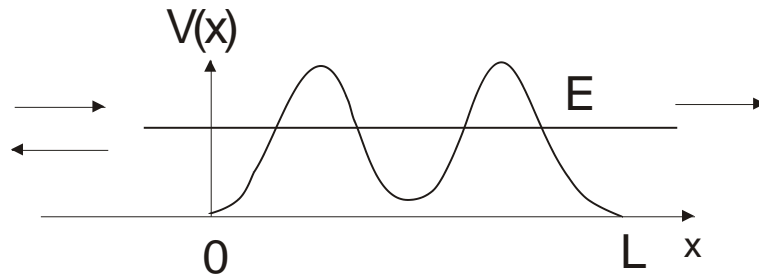


Рис. 2.1. Рассеяние волн на одномерном потенциале: слева имеется источник частиц и отраженные частицы, справа – только прошедшие частицы

Таким образом, состояния рассеяния характеризуются импульсом и его знаком; будем называть такие состояния каналами рассеяния. Пусть теперь на частицу действует потенциал $V(x)$. Предположим, что $V(x)$ отличен от нуля в области порядка L и что $V(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$ (как это изображено на рис. 2.1). Волновая функция подчиняется уравнению

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x). \quad (2.3)$$

Удобно переписать (2.3) в виде

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\psi = 0. \quad (2.3)$$

Решение, соответствующее источникам, находящимся при $x \rightarrow -\infty$ (слева от рассеивателя), записывается в виде

$$\psi(x) = A_1^+ e^{ikx} + A_1^- e^{-ikx}, \quad (2.5)$$

где $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ волновой вектор, $E > 0$. Как видно, решение (2.5) есть суперпозиция двух частных решений, соответствующих падающим и отраженным волнам. Совершенно аналогично, при $x \rightarrow +\infty$ (справа от рассеивателя) имеем

$$\psi(x) = A_r^+ e^{ikx} + A_r^- e^{-ikx}. \quad (2.6)$$

Однако, если источник частиц расположен слева, то при $x \rightarrow +\infty$ есть только уходящая волна ($A_r^- = 0$), поэтому

$$\psi(x) = A_r^+ e^{ikx}. \quad (2.7)$$

Падающие и рассеянные волны можно характеризовать потоками вероятностей. Введем потоки падающих j_0 , отраженных j_R и прошедших j_T частиц. Используя квантово-механическое выражение для потока вероятностей [7], потоки слева и справа от рассеивателя записываются как:

$$j_0 = \frac{\hbar k}{m} |A_l^+|^2, \quad j_R = \frac{\hbar k}{m} |A_l^-|^2, \quad j_T = \frac{\hbar k}{m} |A_r^+|^2. \quad (2.8)$$

Счетчик частиц позволяет определять относительные величины, которые можно характеризовать коэффициентами прохождения

$$T(E) = \frac{j_T}{j_0} = \frac{|A_r^+|^2}{|A_l^+|^2} \quad (2.9)$$

и отражения

$$R(E) = \frac{j_R}{j_0} = \frac{|A_l^-|^2}{|A_l^+|^2}. \quad (2.10)$$

Подобные соотношения нетрудно получить и для случая, когда источник частиц находится справа от рассеивателя.

2.2. S-матрица

Процессы столкновения частиц удобно описывать S- матрицей, которая содержит всю информацию о свойствах рассеивателя [10]. Прежде всего, мы дадим элементарное введение в теорию S - матрицы. Затем мы обсудим, как можно вычислять элементы S - матрицы, а также какую информацию можно извлечь из матрицы рассеяния.

Как видно из (2.9) и (2.10), для вычисления наблюдаемых величин нужно знать только отношения амплитуд. С другой стороны, поскольку уравнение Шредингера линейно, должна существовать линейная связь между амплитудами волн, которую удобно записать в виде

$$\begin{pmatrix} A_r^+ \\ A_l^- \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_l^- \\ A_r^+ \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

где введена матрица S , связывающая амплитуды падающих и уходящих волн. Из (4.11) следует, что элементами S - матрицы являются амплитудные коэффициенты отражения r , r' и прохождения t , t' . Из общих соображений (из сохранения потока вероятностей и симметрии относительно обращения времени) следует [10]:

$$S^+ = S^{-1}, \quad S = S^T. \quad (2.12)$$

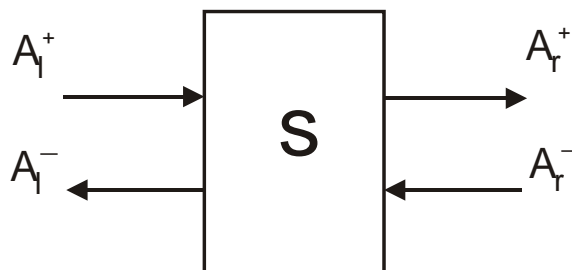


Рис. 2.2. Схема рассеяния. S -матрица – это «черный ящик», который содержит всю информацию о внутренних процессах в системе

Амплитудные коэффициенты отражения и прохождения, рассматриваемые как функции энергии E , содержат богатую информацию о системе. Во-первых, амплитуды t и r определяют коэффициенты прохождения и отражения

$$T(E) = |t|^2, \quad R(E) = |r|^2. \quad (2.13)$$

Во-вторых, полюсы амплитуд в комплексной плоскости E соответствуют дискретным уровням или резонансам [10].

Особый интерес при изучении рассеяния частиц вызывают резонансы. Как известно, в случае, когда туннелирующий через высокий барьер электрон имеет энергию, меньшую, чем величина потенциала, вероятность прохождения электрона мала. При этом она монотонно зависит от энергии. Однако, величина прозрачности может сильно возрасти или даже стать полной, если внутри барьера имеются квазисвязанные состояния [10]. В этом случае возможна конструктивная интерференция волновой функции падающего электрона с волновой функцией квазисвязанного состояния и, как следствие, появляется резонанс в прозрачности. Вблизи резонанса прозрачность как функция энергии имеет форму лоренциана, характеризующегося двумя параметрами: энергией квазисвязанного состояния и шириной резонанса Γ . Квазисвязанное состояние имеет общую природу с истинно связанным состоянием в потенциальном поле [10], поскольку на временах меньше чем $\sim \hbar/\Gamma$ волновая функция частицы в барьере подобна локализованному состоянию. Очевидно также, что если в потенциальном поле имеется много квазисвязанных состояний, то им будет соответствовать серия резонансов в прозрачности барьера. При изменении параметров барьера виртуальные уровни отталкиваются; соответственно расталкиваются резонансы. Иными словами, происходит рассеяние

резонансов, вполне аналогичное рассеянию частиц. Моделирование резонансного рассеяния в квантовой механике представляет особый интерес.

2.3. Внутренняя задача

Пусть потенциал $V(x)$ отличен от нуля в области пространства $0 < x < L$. Исходя из соображений предыдущего раздела, решение при $x < 0$ пишем в виде (для удобства мы переопределим амплитудные коэффициенты):

$$\psi(x) = e^{ikx} + re^{-ikx}. \quad (2.14)$$

При $x > L$ уходящую волну удобно записать как

$$\psi(x) = te^{ik(x-L)}. \quad (2.15)$$

Волновая функция во внутренней области получается путем решения (2.3). Будем полагать потенциал произвольным и попытаемся разработать алгоритм численного решения (2.3) с соответствующими граничными условиями. Для этого сформулируем внутреннюю задачу, т.е. выразим характеристики рассеяния (в данном случае r и t) через волновую функцию $\psi(x)$, заданную во внутренней области: $0 < x < L$. Условия сшивания волновой функции и производной при $x = 0$ дают:

$$\begin{cases} \psi(0) = 1 + r, \\ \psi'(0) = ik(1 - r). \end{cases} \quad (2.16)$$

Исключая r из уравнений (2.16), получим:

$$\psi'(0) + ik\psi(0) = 2ik. \quad (2.17)$$

Аналогичные выражения пишутся для волновой функции и её производной при $x = L$:

$$\begin{cases} \psi(L) = t, \\ \psi'(L) = ikt, \end{cases} \quad (2.18)$$

и мы получаем

$$\psi'(L) - ik\psi(L) = 0. \quad (2.19)$$

Итак, во внутренней области ($0 < x < L$) необходимо решить уравнение (2.4) с условиями (4.17) и (4.19). Если внутренняя задача решена, то из (2.16) и (2.18) можно найти

$$r = -1 + \psi(0), \quad t = \psi(L). \quad (2.20)$$

2.4. Пример аналитического решения внутренней задачи

Решим изложенным выше методом задачу рассеяния частицы в поле (данная задача в дальнейшем будет служить «тестом» программы):

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ -V_0, & 0 < x < L, \\ 0, & x > L. \end{cases} \quad (2.21)$$

Во внутренней области необходимо решить уравнение

$$\psi'' + q^2\psi = 0, \quad (2.22)$$

где $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)$. Решение (4.22) записывается как

$$\psi(x) = ae^{iqx} + be^{-iqx}. \quad (2.23)$$

Постоянные a и b находятся из граничных условий (2.17) и (2.19):

$$\begin{cases} (a-b) + \kappa(a+b) = 2\kappa, \\ (ae^{i\theta} - be^{-i\theta}) - \kappa(ae^{i\theta} + be^{-i\theta}) = 0, \end{cases} \quad (2.24)$$

где $\kappa = k/q$, $\theta = qL$. Определив a и b , мы получим, например, для амплитуды прохождения:

$$t = \frac{4\kappa}{(1+\kappa)^2 e^{-i\theta} - (1-\kappa)^2 e^{i\theta}}. \quad (2.25)$$

Используя выражение (4.25), можно построить график зависимости коэффициента прохождения $T(E)$ от энергии:

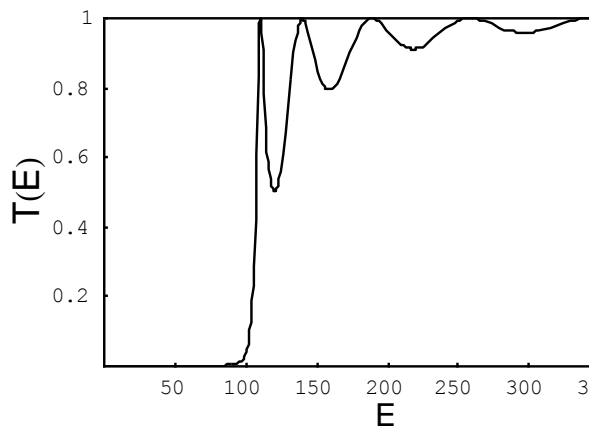


Рис. 2.3. Зависимость прозрачности от энергии частицы при туннелировании через прямоугольный барьер. В качестве единицы энергии используется $E_0 = \hbar^2 / 2mL^2$ (L - ширина барьера), при этом высота барьера равна: $V = 100E_0$

В данной задаче резонансы обусловлены конструктивной интерференцией волн, возникающих при отражении от краев барьера (см. [7,10]). Удобно привлечь аналогию с оптикой и схему Фабри-Перо, интерпретировать резонансную картину прозрачности.

2.5. Метод численного решения внутренней задачи

Таким образом, для произвольного потенциала нам осталось понять, как численно найти элементы матрицы рассеяния. Запишем уравнение Шредингера для волновой функции $\psi_n \equiv \psi(x_n)$ ($n = 0, 1, \dots, N-1, N$, заданной на дискретном множестве точек $x_n = n\Delta$ (узлах сетки, рис. 4.4.) [2-6]:

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + u_n \psi_n = 0, \quad (2.26)$$

где

$$u_n = -2 + \frac{2m\Delta^2}{\hbar^2} (E - V_n), \quad V_n \equiv V(x_n). \quad (2.27)$$

Очевидно, что такая аппроксимация будет справедлива, если шаг сетки Δ мал по сравнению с масштабом изменения волновой функции.

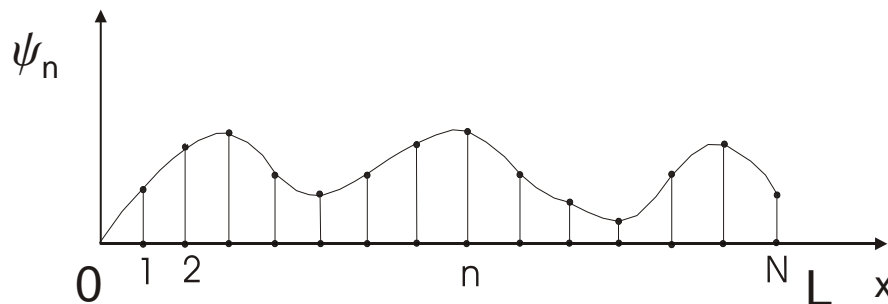


Рис. 2.4. Волновая функция на дискретной решетке во внутренней области

Граничные условия следует записать с учетом того, что теперь мы имеем дело с дискретной решеткой и надо заново вывести соотношения (2.17) и (2.19) исходя из (2.26). Поступая как в разделе 4.4, нетрудно получить [5]

$$\psi_1 + \left(\frac{u_0}{2} + ik\Delta \right) \psi_0 = 2ik\Delta, \quad (2.28)$$

$$\psi_{N-1} + \left(\frac{u_N}{2} + ik\Delta \right) \psi_N = 0. \quad (2.29)$$

Решение (2.26) ищем в виде

$$\psi_{n+1} = R_n \psi_n. \quad (2.30)$$

Подставим в (2.28), и сопоставив с (2.30), получим рекуррентное соотношение для вспомогательных функций R_n :

$$R_{n-1} = -\frac{1}{u_n + R_n}. \quad (2.31)$$

Граничное условие для R_n следует записать на правой границе, поскольку в этом случае оно будет однородным и независимым от волновой функции.

Для вывода подставим $\psi_N = R_{N-1} \psi_{N-1}$ в (2.29):

$$\psi_{N-1} + \left(\frac{u_N}{2} + ik\Delta \right) R_{N-1} \psi_{N-1} = 0. \quad (2.32)$$

Ввиду произвола ψ_{N-1} , равенство (2.32) имеет место, если

$$R_{N-1} = -\frac{1}{\frac{u_N}{2} + ik\Delta}. \quad (2.33)$$

Теперь можно стартовать с R_{N-1} , которое определяется (2.33), и, двигаясь в обратном направлении ($N-2, \dots, 1, 0$), найти все вспомогательные функции: $R_{N-2}, R_{N-3}, \dots, R_1, R_0$. Зная R_0 , мы сможем получить начальное условие для волновой функции. Действительно, подставив $\psi_1 = R_0\psi_0$ в (2.28), получим

$$R_0\psi_0 + \left(\frac{u_0}{2} + ik\Delta\right)\psi_0 = 2ik\Delta,$$

т.е.

$$\psi_0 = \frac{2ik\Delta}{R_0 + \left(\frac{u_0}{2} + ik\Delta\right)}. \quad (2.34)$$

Таким образом, стартуя с (2.34) и используя рекуррентное уравнение для волновой функции (2.30), мы найдем волновую функцию во всех внутренних узлах сетки: $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$. Амплитудные коэффициенты отражения и прохождения находятся согласно

$$r = -1 + \psi_0, \quad t = \psi_N. \quad (2.35)$$

Отметим, что для отыскания оставшихся элементов S -матрицы следует переформулировать задачу, располагая источник рассеяния справа от мишени.

2.6. Численный алгоритм

На основе результатов предыдущего раздела сформулируем алгоритм численного расчета, который может быть реализован на любом языке программирования:

- 1) Задаем энергию туннелирующего электрона E ;
- 2) Вычисляем $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ и $u_n = -2 + \frac{2m\Delta^2}{\hbar^2}(E - V_n)$;
- 3) Вычисляем $R_{N-1} = -\frac{1}{\frac{u_N}{2} + ik\Delta}$;
- 4) Из рекуррентной формулы $R_{n-1} = -\frac{1}{u_n + R_n}$ находим $R_{N-2}, R_{N-3}, \dots, R_1, R_0$;
- 5) Вычисляем $\psi_0 = \frac{2ik\Delta}{R_0 + \left(\frac{u_0}{2} + ik\Delta\right)}$;
- 6) Из рекуррентного соотношения $\psi_{n+1} = R_n\psi_n$ находим $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$;
- 7) Определяем $r = -1 + \psi_0$, $t = \psi_N$;
- 8) Вычисляем $T(E) = |t|^2$, $R(E) = |r|^2$;
- 9) Изменяем энергию, переходим к 2.

Замечание: предварительно необходимо переписать все выражения, входящие в 1-9, в безразмерных переменных.

2.7. Программы в среде *Mathematica*

Первый фрагмент программы строит график потенциального поля (график не приводится). Пользователь может вставить сюда свой потенциал.

(* Барьер *)

```
V[x_]:=If[(x>=0)&&(x<=1),100,0];
```

```
Plot[V[x],{x,-.5,1.5},
```

```
  Axes False,
```

```
  Frame True,
```

```
  PlotRange {{-1,2},{0,150}},
```

```
  FrameLabel
```

```
{FontForm["x"],{"Helvetica",12}],FontForm["V(x)","Helvetica",12]}}
```

```
];
```

Далее в виде модуля оформлена программа, реализующая описанный в разделе 2.6 алгоритм. В качестве теста используется задача о прямоугольном барьере.

Ниже приведена программа, реализующая анимацию сканирования по энергии. Для этого расчет прозрачности и волновой функции ведется согласно изложенному алгоритму для каждой заданной энергии, что составляет отдельный «кадр».

```

T[en_, Nn_] := Module[{},
  e := en;
  Nm := Nn;
  k :=  $\sqrt{e}$ ;
   $\Delta := \frac{1}{Nm}$ ;
  u[n_] :=  $-2 + \Delta^2 (e - V[\Delta * n])$ ;
  Prepend[Array[R, Nm - 1], R[0]];
  Prepend[Array[ $\psi$ , Nm],  $\psi[0]$ ];
  R[Nm - 1] :=  $-\frac{1}{\frac{u[Nm]}{2} + i k \Delta}$ ;
  i = Nm;
  While[i > 0, i = i - 1;
    R[i - 1] =  $-\frac{1}{u[i] + R[i]}$ 
  ];
   $\psi[0] := \frac{2 i k \Delta}{R[0] + (\frac{u[0]}{2} + i k \Delta)}$ ;
  Do[ $\psi[i + 1] = R[i] \psi[i]$ , {i, 0, Nm - 1}
  ];
  Tt := (Abs[ $\psi[Nm]$ ])2;
  Return[Tt ]];
Nmax = 100;
emin := 0.01; emax := 400;
Plot[T[e, Nmax] , {e, emin, emax},
  Frame → True, PlotRange → {{emin, emax}, {0.0, 1.0}
  Frame → True,
  FrameLabel → {FontForm["E", {"Helvetica", 14}],
    FontForm["T(E)", {"Helvetica", 14} ]}
  (*
  Epilog->Graphics[
    {Text[FontForm["L=1.0", {"Helvetica", 14}], {5
    Background→Automatic][[1]]
  *)
1.

```

```

(* Wave function *)
Vm := 70;
V[x_] := If[Abs[x - 0.5] ≤ 0.4,  $\frac{Vm}{2} (0.5 - x)^2$ , 0];
Wave[en_] := Module[{},
  e := en; Nm := 20; Nl := 25; Nr := 5;
  k :=  $\sqrt{-e}$ ;  $\Delta := \frac{1}{Nm}$ ;
  w = {}; pt = {}; et = {};
  Do[AppendTo[pt, {i, N[V[ $\Delta$  i]]}],
    {i, -Nl, Nm + Nr}];
  Do[AppendTo[et, {i, N[0.1 e]}],
    {i, -Nl, Nm + Nr}];
  u[n_] :=  $-2 + \Delta^2 (e - V[\Delta * n])$ ;
  Prepend[Array[R, Nm - 1], R[0]];
  Prepend[Array[ $\psi$ , Nm],  $\psi$ [0]];
  R[Nm - 1] :=  $-\frac{1}{\frac{u[Nm]}{2} + i k \Delta}$ ;
  i = Nm;
  While[i ≥ 0, i = i - 1;
    R[i - 1] =  $-\frac{1}{u[i] + R[i]}$ ];
   $\psi$ [0] :=  $\frac{2 i k \Delta}{R[0] + (\frac{u[0]}{2} + i k \Delta)}$ ;
  Do[AppendTo[w, {-Nl + j, N[(Abs[ei k  $\Delta$  (-Nl+j) + (-1.0 +  $\psi$ [0]) * e-i k  $\Delta$  (-Nl+j)])]}],
    {j, 0, Nl - 1}];
  Do[ $\psi$ [i + 1] = R[i]  $\psi$ [i], {i, 0, Nm - 1}];
  Do[AppendTo[w, {i, N[Abs[ $\psi$ [i]]^2]}], {i, 0, Nm}];
  Do[AppendTo[w, {i, N[(Abs[ $\psi$ [Nm]])^2]}], {i, Nm + 1, Nm + Nr}];
  ww = Interpolation[w];
  Plot[{3 ww[x], V[x / Nm], e}, {x, -Nl, Nm + Nr},
    PlotRange → {{-Nl, Nm + Nr}, {0, 10}}, Frame → True,
    PlotStyle → {{Thickness[.01], Hue[0.15]}, {Thickness[.01], Hue[0.0]},
      {Thickness[.01], Hue[0.75]}}];];
ww = Table[Wave[0.1 + i], {i, 1, 100}];

```

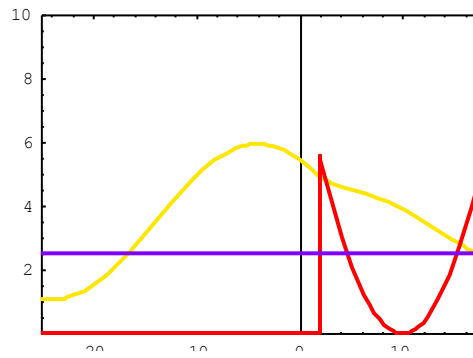


Рис. 2.5. Моделирование процесса туннелирования частицы через «кусоч» параболического барьера. При запуске программы красным цветом изображается потенциал, желтым- квадрат модуля волновой функции

2.8. Вопросы и задания

1. Исходя из закона сохранения потока вероятностей доказать соотношение унитарности: $S^+ = S^{-1}$ (см. [7,10]).
2. Используя тот факт, что уравнение Шредингера инвариантно относительно обращения времени, доказать соотношение: $S = S^T$ (см. [10]).
3. Переписать соотношения: $S = S^T$, $SS^+ = I$ через амплитудные коэффициенты прохождения и отражения (см. [7]) и получить: $R(E) + T(E) = 1$.
4. Получить коэффициенты прохождения и отражения методом раздела 4.5 для прямоугольной ямы и прямоугольного барьера.
5. Вычислить коэффициент прохождения для треугольного барьера

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ \alpha x, & 0 < x < L, \\ 0, & x > L. \end{cases}$$

(Решение во внутренней области выразить через функции Эйри (см. [7])). Построить графики зависимостей коэффициентов прохождения и отражения от энергии.

6. Исходя из формулы Фабри-Перо найти положения резонансов в случае прямоугольно барьера.

7. Пусть на дискретной решетке потенциал отличен от нуля только в одном узле: $V_0 = \alpha$ и равен нулю на остальных узлах. Решая дискретное уравнение Шредингера, найти коэффициенты прохождения и отражения (см. [11]).

8. Исследовать положение полюсов амплитуды прохождения, полученной в задаче 7 (см. [10]).

9. Исходя из дискретного уравнения Шредингера, получить соотношения (4.28) и (4.29) (см. [5]).

10. Про моделировать рассеяние частицы в полях:

10.1.
$$V(x) = \begin{cases} \alpha(x - L/2)^2, & x < L, \\ 0, & x > L. \end{cases}$$
 Изучить резонансы в прозрачности.

10.2.
$$V(x) = \begin{cases} -\frac{\alpha}{ch^2(x - L/2)}, & x < L, \\ 0, & x > L. \end{cases}$$

11. Обобщить полученный алгоритм на случай, когда потенциал имеет различные асимптотики, например: $V(x \rightarrow -\infty) \rightarrow 0$, но $V(x \rightarrow +\infty) \rightarrow V_r = const$ (см. [7,10]).

3. Задача рассеяния. Параллельная версия

Кратко суммируем идею численного решения задачи рассеяния. Метод решения сводится к следующему.

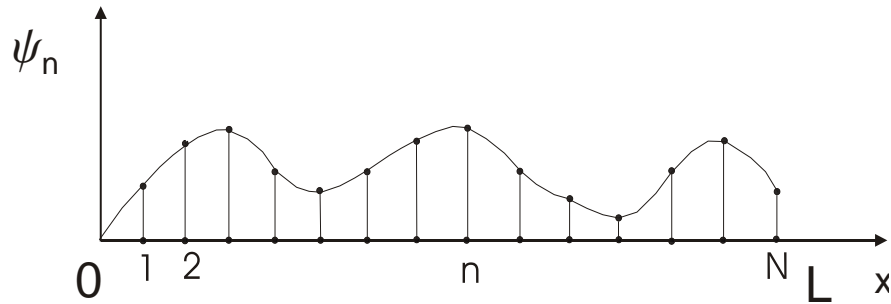


Рис. 3.1. Моделирование процесса туннелирования частицы через потенциальный барьер

Неизвестная волновая функция $\psi_n \equiv \psi(x_n)$ отыскивается на множестве внутренних узлов сетки $x_n = n\Delta$ ($n = 0, 1, \dots, N-1, N$) (см. рис. 3.1). Во внутренней области она подчиняется уравнению:

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + u_n \psi_n = 0, \quad (3.1)$$

где

$$u_n = -2 + \frac{2m\Delta^2}{\hbar^2} (E - V_n), \quad V_n \equiv V(x_n), \quad (3.2)$$

и граничным условиям

$$\psi_1 + \left(\frac{u_0}{2} + ik\Delta \right) \psi_0 = 2ik\Delta, \quad (3.3)$$

$$\psi_{N-1} + \left(\frac{u_N}{2} + ik\Delta \right) \psi_N = 0. \quad (3.4)$$

После того как волновая функция найдена, амплитудные коэффициенты отражения и прохождения вычисляются по формулам.

$$r = -1 + \psi_0, \quad t = \psi_N. \quad (3.5)$$

Математически мы имеем дело с несамосопряженной краевой задачей. Как известно, для решения на компьютере необходимо свести краевую задачу к задаче Коши, которая выполняется шаг за шагом и может быть легко решена численными методами. В предыдущем разделе данная задача решалась методом прогонки. Как следует из приведенного алгоритма, для решения такой задачи требуется $\sim O(N)$ операций, поэтому часто достаточно использовать последовательную версию, чтобы найти коэффициенты прохождения и отражения от сложного барьера даже для большого числа значений энергии электрона. Легко видеть, что в одномерном случае число расчетных узлов можно выбирать достаточно большим (это зависит от мощности компьютера).

3.1. Идея распараллеливания задачи рассеяния

Вычислительные трудности возникают при переходе к многомерным задачам. Ниже мы покажем, что если ввести прямоугольную "узельную" решетку (в двумерном случае) или "узельный" параллелепипед (в трехмерном пространстве), то можно сформулировать алгоритм, подобный приведенному выше для одномерной системы.

Например, рассмотрим двумерную систему. Если ввести прямоугольную двумерную решетку, то волновая функция превращается в столбец, число элементов которого пропорционально числу узлов в перпендикулярном к

направлению рассеяния оси (пусть это будет M – узлов). При этом метод прогонки становится матричным, когда на каждом шаге прогонки необходимо обращать матрицу $N \times M$, а оценка для числа операций приводит к $O(N \times M^3)$. Главное отличие состоит в том, что прогоночные коэффициенты становятся теперь матрицами, размерность которых определяется числом узлов в поперечном направлении. Соответственно, мы будем иметь матричную задачу прогонки, которая оказывается существенно затратной, поскольку на каждом шаге по направлению прогонки требуется обращать матрицы, а число таких обращений будет расти с ростом N . Понятно поэтому наше желание разработать алгоритм распараллеливания, позволяющий ускорить процесс вычисления.

3.2. Блочное разбиение

Для ускорения решения задачи разобьем область, состоящую из N узлов, на которых задана волновая функция, на L сегментов, считая, что $L = N/M$ (при большом числе расчетной сетки это условие всегда можно выполнить). Пусть индекс K нумерует функцию в начальных узлах сегментов ($K = 0, M, 2M, \dots, N$). Волновую функцию на узлах укрупненной сетки обозначим $\psi_0, \psi_M,$

$$\psi_{2M}, \psi_{3M}, \dots, \psi_{K-M}, \psi_K$$

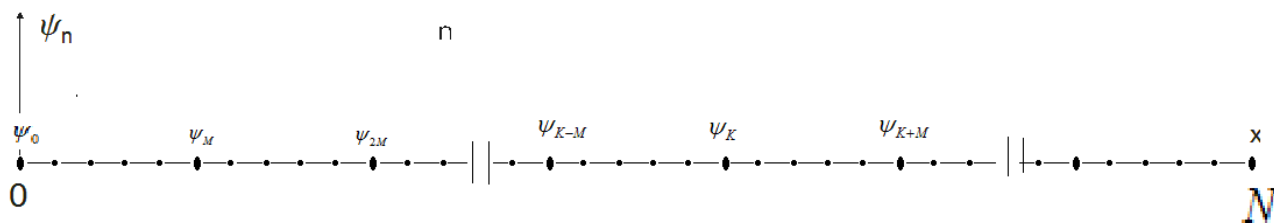


Рис. 3.2. Блочное разбиение области распределения

Рассмотрим сначала сегмент, расположенный между узлами K и $K+M$. Решение (3.1) в силу линейности уравнения внутри сегмента можно представить в виде:

$$\psi_n = U_n \cdot \psi_K + V_n \cdot \psi_{K+M} \quad (3.6)$$

Условие на левом конце приводит к граничным условиям вида

$$U_K = 1, \quad V_K = 0.$$

Аналогично, выполнив сравнение на правом конце, найдем:

$$U_{K+M} = 0, \quad V_{K+M} = 1.$$

Теперь мы можем подставить (3.5) в уравнение (3.1) и получить уравнения непосредственно для функций U_n и V_n :

$$U_{n+1} + U_{n-1} + u_n U_n = 0, \quad (3.7)$$

$$V_{n+1} + V_{n-1} + u_n V_n = 0. \quad (3.8)$$

Поясним смысл полученных уравнений. Фактически, уравнения (3.7-3.8) представляют собой хорошо известную из теории дифференциальных уравнений фундаментальное решение. Для уравнения второго порядка линейно независимых решений всегда два. При этом два возникших решения соответствуют двум случаям возбуждения волн слева и справа (на границах области), т.е. возбуждения волн, которые распространяются в противоположных направлениях.

С вычислительной точки зрения эти уравнения замечательны тем, что мы можем решать их независимо на каждом сегменте, а следовательно, можем

использовать метод распределенных вычислений для поиска решений, распределив вычисления независимых уравнений по различным процессорам.

3.3. Алгоритм решения с использованием параллельной версии

Если поставленная задача решена для каждого сегмента, то дальнейшая стратегия сводится к следующему. Рассмотрим два смежных сегмента $(K-M, K)$ и $(K, K+M)$. Запишем уравнение (3.1) относительно точки сопряжения K в виде:

$$\psi_{K+1} + \psi_{K-1} + u_K \psi_K = 0. \quad (3.9)$$

Функции ψ_{K-1} и ψ_{K+1} лежат в соседних сегментах и могут быть найдены из уравнений типа (3.8), соответственно записанных в смежных сегментах. После подстановки в (3.8), приходим к выражению

$$V_{K+1} \psi_{K+M} + U_{K-1} \psi_{K-M} + (U_{K+1} + V_{K+1} + u_K) \psi_K = 0. \quad (3.10)$$

Таким образом, найдя коэффициенты уравнения на крупномасштабной сетке, мы сможем решать для редуцированного числа переменных новое уравнение, у которого число переменных меньше в N/M раз чем в исходном. Для этого можно использовать метод, разработанный в разделе 3. Чтобы продвинуться дальше, также необходимо переписать соответствующим образом граничные условия.

3.4. Алгоритм решения двумерного уравнения Шредингера

Рассмотрим теперь двумерное уравнение Шредингера для волновой функции $\Psi(x, y)$:

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x, y))\Psi = 0. \quad (3.11)$$

Рассмотрим рассеяние волн в двумерном электронном волноводе (рис. 3.2). Нас будут интересовать коэффициенты прохождения и отражения. Как известно, они определяют проводимость (кондактанс) канала.

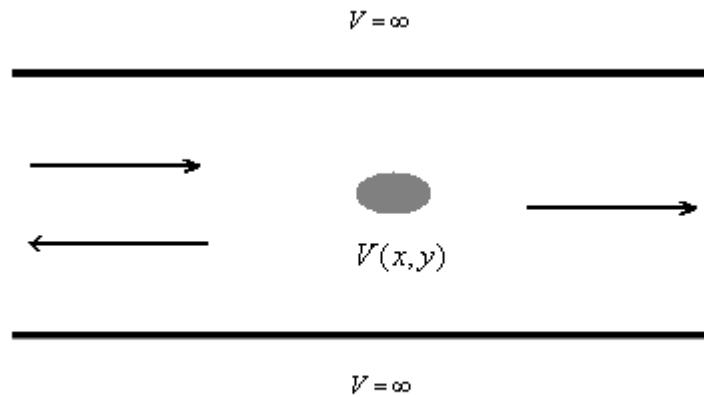


Рис. 3.2. Задача рассеяния в двумерной области. Черные параллельные означают потенциал, запирающий электрон в волноводе. Внутри расположен рассеиватель - двумерный потенциал. Слева падают волны, которые отражаются и проходят направо.

Решение двумерного уравнения Шредингера в идеальном (без рассеивающего потенциала) волноводе можно искать методом разделения переменных:

$$\Psi(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n(x) \chi_n(y), \quad (3.12)$$

Подставляя (3.12) в уравнение (3.11), в котором $V(x, y) = 0$, получаем, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi_n}{\partial x^2} \chi_n(y) + \frac{\partial^2 \chi_n}{\partial y^2} \Psi_n(x) + k^2 \Psi_n(x) \chi_n(y) &= 0, \\ \frac{1}{\Psi_n} \frac{\partial^2 \Psi_n}{\partial x^2} + \frac{1}{\chi_n} \frac{\partial^2 \chi_n}{\partial y^2} + k^2 &= 0, \end{aligned} \quad (3.13)$$

где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$.

Пусть

$$\frac{\partial^2 \chi_n}{\partial y^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_n \chi_n = 0, \quad (3.14)$$

и на стенках $y=0$, $y=b$ волновода ширины b выполняются граничные условия (жесткая стенка): $\chi_n(0) = 0$, $\chi_n(b) = 0$. Тогда поперечная структура моды имеет вид:

$$\chi_n = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin\left(\frac{\pi n y}{b}\right), \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mb^2}. \quad (3.15)$$

Продольная волновая функция $\Psi_n(x)$ определяется уравнением:

$$\frac{\partial^2 \Psi_n}{\partial x^2} + p_n^2 \Psi_n(x) = 0, \quad (3.16)$$

где

$$p_n = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - E_n)} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mb^2} \right)}. \quad (3.17)$$

Если $E > E_n$, то мода является распространяющейся вдоль оси x (канал n открыт):

$$\Psi_n = A_n \exp(ip_n x) + B_n \exp(-ip_n x). \quad (3.18)$$

Если $E < E_n$, то мода является не распространяющейся вдоль оси x (канал n закрыт).

Нарисуем графики зависимостей $E(p_n) = E_n + \frac{\hbar^2}{2m} p_n^2$, представляющие собой набор смещенных друг относительно друга парабол (см. Рис. 3.2). Из рисунка видно, что в зависимости от энергии в волноводе может распространяться разное число мод.

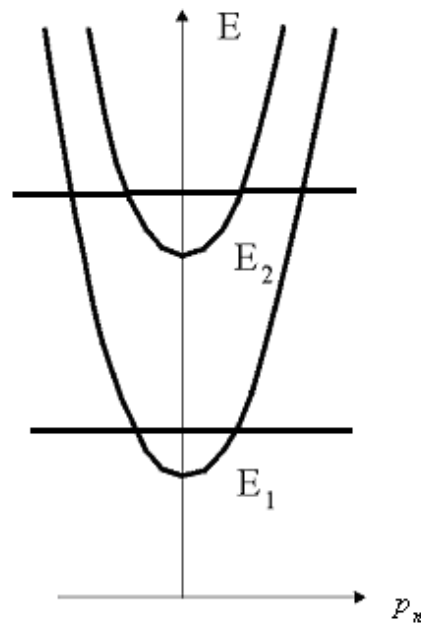


Рис. 3.2. Дисперсионные кривые

Матрица рассеяния \hat{S} , характеризующая помещенный в волновод рассеивающий потенциал $V(x, y)$, по своему определению связывает амплитуды волн в открытых каналах. Эта матрица состоит из четырех блоков, размерность каждого из которых определяется числом распространяющихся при заданной энергии E волн:

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} \hat{r} & \hat{t}' \\ \hat{t} & \hat{r}' \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Условие сохранения потока вероятности записывается в данном случае в следующем виде:

$$\sum_{n=1}^N p_n |A_n|^2 = \sum_{n=1}^N p_n |t_n|^2 |A_n|^2 + \sum_{n=1}^N p_n |r_n|^2 |A_n|^2, \quad (3.20)$$

где A_n - амплитуда падающей n -ой распространяющейся моды, а N - полное число распространяющихся при заданной энергии E мод.

Для численного решения уравнение Шредингера записываем на двумерной сетке:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x, y) + V(x, y) \Psi(x, y) = E \Psi(x, y). \quad (3.27)$$

Волновая функция задана в узлах двумерной сетки:

$$\Psi_{mn} = \Psi(y_m, x_n), \quad (3.28)$$

Из (3.27) можно записать дискретное уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\Psi_{m+1n} - 2\Psi_{mn} + \Psi_{m-1n}}{\Delta x^2} + \frac{\Psi_{mn+1} - 2\Psi_{mn} + \Psi_{mn-1}}{\Delta y^2} \right) + V(x_n, y_m) \Psi_{mn} = E \Psi_{mn} \quad (3.29)$$

$$x_n = n\Delta x, \quad y_m = m\Delta y,$$

$$\Delta x = \Delta y \equiv \Delta. \quad (3.30)$$

Или более кратко:

$$\Psi_{mn+1} + \Psi_{mn-1} + \Psi_{m+1n} + \Psi_{m-1n} + (K_{nm}^2 - 4) \Psi_{mn} = 0, \quad (3.31)$$

$$(3.33)$$

$$K_{n,m}^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x_n, y_m)) \Delta^2.$$

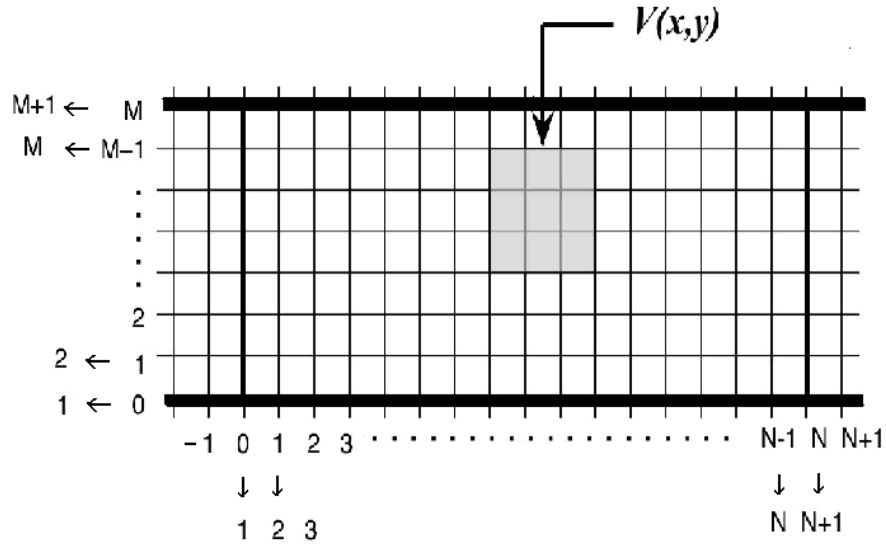


Рис. 3.3. Расчетная сетка для двумерной области

Рисунок (3.3) показывает как ввести "столбики" - векторы- Φ_n для каждого фиксированного значения n :

$$\Phi_n = \begin{pmatrix} \Psi_{1 n} \\ \vdots \\ \Psi_{M-1 n} \end{pmatrix}, \quad (3.34)$$

Теперь мы видим, что можно записать матричное уравнение для "столбиков", которое формально выглядит как одномерное:

$$\Phi_{n+1} + U_n \Phi_n + \Phi_{n-1} = 0. \quad (3.35)$$

В (3.34) введена матрица:

$$(U_n)_{m,m'} = (K_{n,m}^2 - 4) \delta_{m,m'} + \delta_{m,m'+1} + \delta_{m,m'-1}, \quad (3.36)$$

которая содержит также информацию о рассеивающем потенциале согласно (3.33). Более подробно, можно расписать 93.35) в виде:

$$\Psi_{m\ n+1} + \sum_{m'} (U_n)_{mm'} \Psi_{m'n} + \Psi_{m\ n-1} = 0. \quad (3.37)$$

Поперечная волновая функция с учетом нормировки:

$$\chi_s(m) = \sqrt{\frac{2}{\Delta M}} \sin\left[\left(\frac{\pi s}{M}\right)m\right], \quad (3.38)$$

где s - номер моды. Смысл поперечной базисной функции иллюстрирует рис. 3.4.

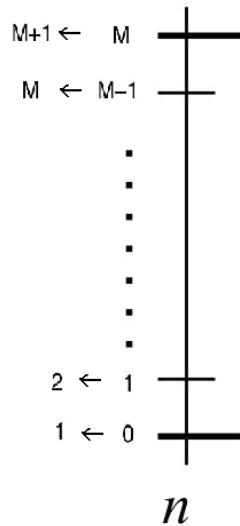


Рис. 3.4. Волновая функция - столбец в направлении, перпендикулярном распространению волны

Перейдем теперь к выводу граничных условий. Схема расчета приведена на рис. 3.5.

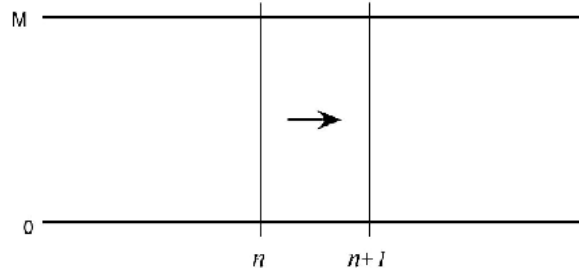


Рис. 3.5. Схема расчета

Вне рассматриваемой области (в идеальном волноводе) волновая функция для s -ой моды:

$$\Psi_{mn}^s = (I_{0s} e^{-ip_s \Delta n} + r_s e^{ip_s \Delta n}) \chi_s(m), \quad x < 0, \quad (3.39)$$

$$\Psi_{mn}^s = t_s e^{-ip_s \Delta n} \chi_s(m), \quad x > L, \quad (3.40)$$

где:

$$p_s = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - E_s)} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{\pi^2 \hbar^2 s^2}{2mb^2} \right)} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{\pi^2 \hbar^2 s^2}{2m(\Delta M)^2} \right)} \quad (3.41)$$

Окончательно:

$$n \leq 0 \quad \Psi_{mn} = \sum_s (I_{0s} e^{-ip_s \Delta n} + r_s e^{ip_s \Delta n}) \chi_s(m); \quad (3.42)$$

Итак, граничное условие на левой границе области

$$n = 0: \quad \Psi_{m0} = \sum_s (I_{0s} + r_s) \chi_s(m), \quad (3.43)$$

Используя условие ортогональности, получаем:

$$I_{0s} + r_s = \sum_{m'} \chi_s^{-1}(m') \Psi_{m'0} \quad (3.44)$$

$$\Psi_{m-1} = \sum_s \left(I_{0s} e^{ip_s \Delta} + \left(-I_{0s} + \sum_{m'} \Psi_{m'0} \chi_s^{-1}(m') \right) e^{-ip_s \Delta} \right) \chi_s(m),$$

$$\Psi_{m-1} = \sum_s \left(I_{0s} (e^{ip_s \Delta} - e^{-ip_s \Delta}) + \sum_{m'} \Psi_{m'0} \chi_s^{-1}(m') e^{-ip_s \Delta} \right) \chi_s(m). \quad n = -1$$

$$\Psi_{m-1} - \sum_s \left(\sum_{m'} \Psi_{m'0} \chi_s^{-1}(m') e^{-ip_s \Delta} \right) \chi_s(m) = \sum_s I_{0s} (e^{ip_s \Delta} - e^{-ip_s \Delta}) \chi_s(m) =$$

$$= 2i \sum_s I_{0s} \sin(p_s \Delta) \chi_s(m). \quad (3.45)$$

Уравнение Шредингера для $n = 0$:

$$\Psi_{m1} + \sum_{m'} (U_0)_{mm'} \Psi_{m'0} + \Psi_{m-1} = 0,$$

$$\Psi_{m1} + \sum_{m'} (U_0)_{mm'} \Psi_{m'0} + \sum_s \left(\sum_{m'} \Psi_{m'0} \chi_s^{-1}(m') e^{-ip_s \Delta} \right) \chi_s(m) = -2i \sum_s I_{0s} \sin(p_s \Delta) \chi_s(m),$$

$$\Psi_{m1} + \sum_{m'} \left((U_0)_{mm'} + \kappa_{mm'} \right) \Psi_{m'0} = -2i \sum_s I_{0s} \sin(p_s \Delta) \chi_s(m), \quad (3.46)$$

где $\kappa_{mm'} = \sum_s \chi_s^{-1}(m') e^{-ip_s \Delta} \chi_s(m)$

Выведем теперь граничное условие на правой границе. В идеальном волноводе (там где нет рассеивателей), можно записать:

$$n \geq N \quad \Psi_{mn} = \sum_s c_s e^{ip_s \Delta(N-n)} \chi_s(m); \quad (3.47)$$

Непосредственно на границе условие сшивки имеет вид:

$$n = N \quad \Psi_{mN} = \sum_s c_s \chi_s(m), \quad (3.48)$$

где $c_s = \sum_{m'} \chi_s^{-1}(m') \Psi_{m'N}$.

$$n = N + 1 \quad \Psi_{mN+1} = \sum_s c_s e^{-ip_s \Delta} \chi_s(m). \quad (3.49)$$

Уравнение Шредингера при $n = N$ дает:

$$\begin{aligned} \Psi_{mN+1} + \sum_{m'} (U_N)_{mm'} \Psi_{m'N} + \Psi_{mN-1} &= 0, \\ \Psi_{mN-1} + \sum_{m'} (U_N)_{mm'} \Psi_{m'N} + \sum_s c_s e^{-ip_s \Delta} \chi_s(m) &= \\ = \Psi_{mN-1} + \sum_{m'} (U_N)_{mm'} \Psi_{m'N} + \sum_s \sum_{m'} \chi_s^{-1}(m') \Psi_{m'N} e^{-ip_s \Delta} \chi_s(m) &= 0, \\ \Psi_{mN-1} + \sum_{m'} \left((U_N)_{mm'} + \kappa_{mm'} \right) \Psi_{m'N} &= 0, \end{aligned} \quad (3.50)$$

где $\kappa_{mm'} = \sum_s \chi_s^{-1}(m') e^{-ip_s \Delta} \chi_s(m)$.

Таким образом, граничное условие в матричной форме приобретает вид:

$$\Psi_{mN-1} + \sum_{m'} (\Gamma_N)_{mm'} \Psi_{m'N} = 0, \quad (3.51)$$

где $(\Gamma_N)_{mm'} = [U_N + \kappa]_{mm'}$

Таким образом, во внутренней области необходимо решать уравнение

$$\Phi_{n+1} + U_n \Phi_n + \Phi_{n-1} = 0. \quad (3.52)$$

Граничное условие на правом конце:

$$\Phi_{N-1} = -\Gamma_N \Phi_N. \quad (3.53)$$

Граничное условие на левом конце:

$$\Phi_1 + \Gamma_0 \Phi_0 = S_0. \quad (3.54)$$

Можно провести сравнение полученной системы (3.52)-(3.54) с одномерным случаем. Как видно, формально уравнения и граничные условия имеют совершенно аналогичный вид. Важное отличие состоит только в том, что вместо волновой функции мы имеем вектор размерности M , который подчиняется одномерному векторному уравнению. В то же время, на границах областей фигурируют матрицы $M \times M$.

Обсудим здесь принципиальные отличия схемы решения в двумерном виде.

Введем матрицу R_n через $\Phi_{n+1} = R_n \Phi_n$ и подставим в уравнение Шредингера:

$$\begin{aligned} \Phi_{n+1} + U_n \Phi_n + \Phi_{n-1} &= R_n \Phi_n + U_n \Phi_n + \Phi_{n-1} = 0 \\ (R_n + U_n) \Phi_n &= -\Phi_{n-1} \end{aligned} \quad (3.55)$$

$$(R_n + U_n) R_{n-1} = -\hat{E}$$

Тогда граничное условие на правом конце $\Phi_{N-1} = -\Gamma_N \Phi_N$ с учетом $\Phi_N = R_{N-1} \Phi_{N-1}$ переписется в виде $-\Gamma_N R_{N-1} = \hat{E}$, а граничное условие на левом конце $\Phi_1 + \Gamma_0 \Phi_0 = S_0$ с учетом $\Phi_1 = R_0 \Phi_0$ в виде $(R_0 + \Gamma_0) \Phi_0 = S_0$. Отсюда легко восстановить возможную схему алгоритма решения:

$$\begin{aligned}
1) \quad & -\Gamma_N R_{N-1} = \hat{E} \longrightarrow R_{N-1} \\
2) \quad & R_{n-1} = -(R_n + U_n)^{-1} \hat{E} \longrightarrow R_{N-2}, R_{N-3} \dots R_1, R_0 \\
3) \quad & (R_0 + \Gamma_0) \Phi_0 = S_0 \longrightarrow \Phi_0 \\
4) \quad & \Phi_{n+1} = R_n \Phi_n \longrightarrow \Phi_1, \Phi_2 \dots \Phi_N \\
5) \quad & r_s = \sum_{m'} \chi_s^{-1}(m') \Psi_{m'0} - I_{0s} \\
& c_s = \sum_{m'} \chi_s^{-1}(m') \Psi_{m'N}
\end{aligned} \tag{3.56}$$

Чтобы эти формулы записать в матричной форме, можно ввести матрицы $\hat{\chi}$, \hat{c} , \hat{r} , \hat{I}_0 с элементами $\chi(m,s)$, $I_0(s,1)$, $c(s,1)$, $r(s,1)$ соответственно, тогда:

$$\begin{aligned}
& \hat{\chi} \hat{c} = \Phi_N \longrightarrow \hat{c} \\
& \hat{\chi}(\hat{r} + \hat{I}_0) = \Phi_0 \longrightarrow \hat{r}
\end{aligned} \tag{3.57}$$

Алгоритм, выражаемый (3.56) аналогичен одномерному случаю. Видно только, что мы должны решать на каждом шаге уравнение: $R_{n-1} = -(R_n + U_n)^{-1} \hat{E}$. При этом на каждом шаге рекурсии необходимо обращать матрицу $(R_n + U_n)$. Именно эта процедура наиболее затратна. Использование изложенного выше метода распараллеливания может существенно уменьшить число обращений матриц, а тем самым ускорить решение задачи рассеяния.

3.5. Задачи для самостоятельного решения

1. Обобщить предложенную схему для трехмерного уравнения Шредингера.
2. Модифицировать алгоритм решения задачи рассеяния для использования в системах с GPU.
3. Провести численное моделирование и выполнить сравнительный анализ работы версий для CPU и GPU.

КРАТКИЕ ВЫВОДЫ

В работе излагается простейший алгоритм численного решения уравнения Шредингера, основанный на методах стандартной линейной алгебре. Продемонстрирована общая идеология вывода разностной схемы на основе вариационного метода. Прослежена связь дискретных и непрерывных подходов (что необходимо для интерпретации и тестирования программ). Приведены конкретные примеры численного решения уравнения Шредингера для различных потенциалов и дана интерпретация полученных результатов.

Во втором разделе разработан алгоритм численного решения уравнения Шредингера на решетке. В этом разделе излагается метод, который базируется на сведении уравнения второго порядка к уравнению первого порядка - уравнению Риккати. Полученное уравнение решается методом прямой и обратной прогонки.

В последнем разделе излагается параллельная версия задачи рассеяния. Сначала описывается физическая идея распараллеливания уравнения Шредингера. Показано, что метод, описанный во втором разделе допускает блочное разбиение. Предложен алгоритм решения задачи рассеяния на многопроцессорном комплексе.

Разработанный алгоритм решения задачи рассеяния показывает эффективное распараллеливание при использовании распределенных вычислительных систем. В изложенном пособии обсуждается только версия, приспособленная для машин с CPU архитектурой, поскольку при формулировке используется блочное разбиение области определения волновой функции и оператора Гамильтона. Возможно, что использование данного алгоритма для GPU систем может создать дополнительные трудности, поскольку замедление может быть обусловлено спецификой передачи данных [6-8]. В самостоятельных задачах предполагается модифицировать алгоритм для применения GPU.

СПИСОК ЦИТИРУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Т. 1–2. М.: Мир, 1990.
2. Калиткин Н.Н. Численные методы. М.: Наука, 1978.
3. Годунов С.К., Рябенский В.С. Введение в теорию разностных схем. Физматгиз, 1977.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (Нерелятивистская теория). М.: Наука, 1989.
5. Фейнман Р., Лайтон Р., Сендс М. Фейнмановские лекции по физике. Вып. 9. Гл. 11, 14. М.: Мир, 1977.
6. В.П. Гергель. Курс лекций «Параллельное программирование», Н. Новгород, ННГУ, 2005.
7. В.В. Воеводин, Вл.В. Воеводин. Параллельные вычисления, СПб: БХВ-Петербург, 2004 г.
8. М.П. Левин. Параллельное программирование с использованием OpenMP, М: Бином, 2008 г.