

УДК 519.633, 538.9

Численное моделирование эволюции состояний полярона

И. В. Амирханов*, Е. В. Земляная*, В. Д. Лахно[†],
Д. З. Музафаров*, И. В. Пузынин*,
Т. П. Пузынина*, З. А. Шарипов*

* Лаборатория информационных технологий
Объединённый институт ядерных исследований
ул. Жолио-Кюри, д. 6, Дубна, Московская область, 141980, Россия

[†] Институт математических проблем биологии РАН
ул. Институтская, д. 4, г. Пущино, Московская область, 142290, Россия

В работе исследуется эволюция полярона в однородной среде в зависимости от параметров модели и начальных условий, которые выбираются в виде различных комбинаций стационарных поляронных состояний. Представлены вычислительная схема и результаты численного моделирования.

Ключевые слова: эволюция полярона, конечно-разностная схема, численные методы.

1. Введение

Полярны определяют многие процессы в ионных кристаллах [1], полупроводниках, полярных жидкостях и биологических системах [2–4]. Представление о биполяронных состояниях играет важную роль при объяснении такого явления, как высокотемпературная сверхпроводимость. Поляронные состояния используются в современной наноэлектронике при описании переходов в квантовых точках. Поляронными эффектами объясняются полосы поглощения центров окраски в ионных кристаллах. В полярных средах сольватированные состояния электронов представляют собой поляронные состояния и определяют химические реакции, выполняя роль сильнейшего восстановителя. В полимерах полярны являются основными носителями тока. Их проводящие свойства используются при создании сверхлёгких проводников и аккумуляторов. В биологии полярны или солитоны объясняют возможность переноса энергии на большое расстояние. Их изучение даёт основу для создания таких качественно новых устройств нанобиоэлектроники, как нанобиочипы и электронные нанобиосенсоры.

Модель эволюции произвольного начального состояния полярона описывается системой связанных квантово-классических динамических уравнений [5,6]. Это система нелинейных интегро-дифференциальных уравнений, общими характеристиками которой являются многопараметричность (физическими параметрами задачи являются: v — скорость полярона, Ω — частота оптических колебаний ионов, γ — параметр трения, m^* — масса полярона и т.д.) и многомерность конфигурационного пространства. Стационарные решения этой системы исследованы многими авторами (см., в частности, [7] и цитируемую литературу).

Основной задачей нашего исследования является изучение временной эволюции различных начальных состояний полярона в отсутствие и при наличии трения. Здесь мы ограничиваемся случаем неподвижного полярона ($v = 0$). В работе исследуется численная схема для решения системы нелинейных дифференциальных уравнений, описывающей эволюцию полярона в однородной среде, и представлены результаты численного моделирования для конкретного набора значений физических параметров модели.

2. Постановка задачи

В работе [5] предложена система нелинейных уравнений для описания эволюции полярона. В частном случае, для сферически симметричного неподвижного полярона с учётом трения [6] эта система записывается в следующем виде:

$$\begin{cases} \left[i2\bar{m}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\bar{m}\frac{\varphi}{x} \right] \psi = 0, \\ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \Theta, \\ \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \gamma\frac{\partial}{\partial t} + \omega^2 \right] \Theta = -\frac{\omega^2}{\tilde{\varepsilon}} \frac{|\psi|^2}{x}, \end{cases} \quad (1)$$

где ψ — волновая функция, φ — потенциал, Θ , \bar{m} , γ , ω , $\tilde{\varepsilon}$ — безразмерные параметры модели. Система (1) дополняется следующими начальными и граничными условиями:

$$\begin{aligned} \psi(x, t)|_{t=0} &= \Psi_k (\cos(\lambda_k \pi/4) + i \sin(\lambda_k \pi/4)), \\ \Theta(x, t)|_{t=0} &= -\frac{1}{\tilde{\varepsilon}} \frac{\Psi_k^2}{x}, \quad \frac{\partial}{\partial t} \Theta(x, t) \Big|_{t=0} = 0, \quad \varphi(0) = 0, \quad \varphi'(\infty) = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь λ_k и Ψ_k — собственные значения и собственные функции соответствующей стационарной задачи:

$$\begin{cases} \left[\frac{d^2}{dx^2} - 2\bar{m}\lambda + 2\bar{m}\frac{\Phi(x)}{x} \right] \Psi(x) = 0, \\ \frac{d^2}{dx^2} \Phi(x) = -\frac{1}{\tilde{\varepsilon}} \frac{\Psi^2(x)}{x}, \quad 0 \leq x \leq \infty, \end{cases} \quad (3)$$

с граничными условиями и с условием нормировки:

$$\Psi(0) = 0, \quad \Phi(0) = 0, \quad \Psi(\infty) = 0, \quad \Phi'(\infty) = 0, \quad \int_0^{\infty} \Psi^2(x) dx = 1. \quad (4)$$

Решая систему (3),(4) с помощью непрерывного аналога метода Ньютона [7], находим решения $\{\Psi_k, \lambda_k\}$, где $k = 0, 1, 2, \dots$, $\{\Psi_0, \lambda_0\}$ — собственная функция и собственное значение основного состояния (безузловое решение), $\{\Psi_1, \lambda_1\}$ — собственная функция и собственное значение первого возбуждённого состояния и т.д. На рис. 1 показаны первые три собственные функции системы (3), (4). Соответствующие собственные значения равны $\lambda_0 = -0,16277$, $\lambda_1 = -0,0308$, $\lambda_2 = -0,0125$ ($\bar{m} = 1$, $\tilde{\varepsilon} = 1$).

3. Схема численного исследования

Введём равномерную сетку с шагами h_x , h_t соответственно по переменным x и t :

$$\{x_m = mh_x (m = 0, 1, \dots, l), \quad t_n = nh_t (n = 0, 1, \dots)\}.$$

Для решения системы (1) с начальными и граничными условиями (2) будем использовать следующую неявную конечно-разностную схему порядка аппроксимации $O(h_t + h_x^2)$ [8]:

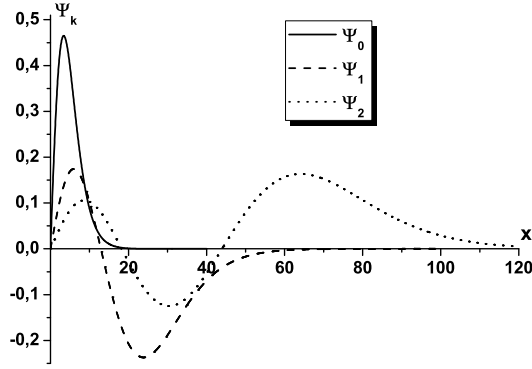


Рис. 1. Собственные функции системы (3)

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\psi_m^{n+1} - \psi_m^n}{h_t} = i \left\{ \sigma \left[\frac{\psi_{m+1}^{n+1} - 2\psi_m^{n+1} + \psi_{m-1}^{n+1}}{2\bar{m}h_x^2} + \frac{\varphi_m^{n+1}}{mh_x} \psi_m^{n+1} \right] + \right. \\ \left. + (1 - \sigma) \left[\frac{\psi_{m+1}^n - 2\psi_m^n + \psi_{m-1}^n}{2\bar{m}h_x^2} + \frac{\varphi_m^n}{mh_x} \psi_m^n \right] \right\}, \\ \frac{\varphi_{m+1}^{n+1} - 2\varphi_m^{n+1} + \varphi_{m-1}^{n+1}}{h_x^2} = \Theta_m^{n+1}, \\ \frac{\Theta_m^{n+1} - 2\Theta_m^n + \Theta_m^{n-1}}{h_t^2} + \gamma \frac{\Theta_m^{n+1} - \Theta_m^n}{h_t} + \omega^2 \Theta_m^{n+1} = -\frac{\omega^2 |\psi_m^n|^2}{\tilde{\varepsilon} mh_x}, \\ \psi_m^0 = \Psi_k(\cos(\lambda_k \pi/4) + i \sin(\lambda_k \pi/4)); \quad \Theta_m^{-1} = -\frac{1}{\tilde{\varepsilon} mh_x} |\psi_m^0|^2; \\ \Theta_m^0 = \Theta_m^{-1}; \quad \varphi_0^n = 0; \quad \varphi_l^n = \varphi_{l-1}^n; \quad m = 1, 2, \dots, l; \quad n = 0, 1, 2, \dots, \end{array} \right. \quad (5)$$

где $\sigma = 0, 5$, Ψ_k , λ_k соответственно собственные функции и собственные значения стационарной задачи (3), (4).

Для решения задачи (1), (2) по схеме (5) на каждом слое с номером n использовался следующий алгоритм:

- 1) решается третье уравнение при известном ψ^n относительно Θ^{n+1} ;
- 2) решается второе уравнение для найденного Θ^{n+1} , определяется φ^{n+1} ;
- 3) решается первое уравнение и вычисляется ψ^{n+1} на следующем временном слое;
- 4) переход к п.1 для следующего значения n .

Тестирование вычислительной схемы (5) проводилось с помощью модельных расчётов для уравнения Шрёдингера с кулоновским потенциалом, которое совпадает с первым уравнением системы (1) при $\varphi = 1$. В этом случае для уравнения Шрёдингера известны аналитические решения. По результатам проведённого сравнительного анализа численных и аналитических решений уравнения Шрёдингера были выбраны параметры дискретной сетки $h_x = 0,01$ и $h_t = 0,001$, для которых отклонение численного решения от аналитического не превышает $4 \cdot 10^{-4}$ на промежутке времени $0 \leq t < 10^5$, соответствующем характерному периоду колебаний в системе «электрон–деформированное поле».

Для визуализации численных результатов вычислялась энергия $W(t)$ по формуле:

$$W(t) = \frac{1}{2\bar{m}} \int \left| \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right|^2 dx - \int \frac{\varphi(x, t) |\psi(x, t)|^2}{x} dx.$$

Отметим, что поскольку расчёты велись в безразмерных единицах, энергия $W(t)$ также является безразмерной величиной.

4. Численные результаты и выводы

Численные эксперименты [9] показали, что если в качестве начального условия (2) взято стационарное состояние полярона, полученное путём численного решения задачи (3), (4), форма полярона со временем не меняется.

В данной работе исследовалась эволюция начальных поляронных состояний, заданных в форме комбинаций стационарных состояний полярона:

$$\Psi(x, t)|_{t=0} = N \left[\Psi_0 \exp\left(i\pi \frac{\lambda_0}{4}\right) + \Psi_1 \exp\left(i\pi \frac{\lambda_1}{4}\right) \right], \quad (6)$$

$$\Psi(x, t)|_{t=0} = N \left[\Psi_0 \exp\left(i\pi \frac{\lambda_0}{4}\right) + \Psi_2 \exp\left(i\pi \frac{\lambda_2}{4}\right) \right], \quad (7)$$

$$\Psi(x, t)|_{t=0} = N \left[\Psi_1 \exp\left(i\pi \frac{\lambda_1}{4}\right) + \Psi_2 \exp\left(i\pi \frac{\lambda_2}{4}\right) \right]. \quad (8)$$

Здесь N — нормировочная константа, Ψ_0 — волновая функция основного состояния, $\Psi_{1,2}$ — волновая функция первого и второго возбуждённых состояний.

На рис. 2, 3, 4 представлены результаты численного решения задачи (1), (2) с начальными условиями (6), (7), (8) соответственно, при значениях параметров $\bar{m} = 1$, $\omega = 1$, $\tilde{\varepsilon} = 1$, $N = 0,5$, $\gamma = 0$ и 4.

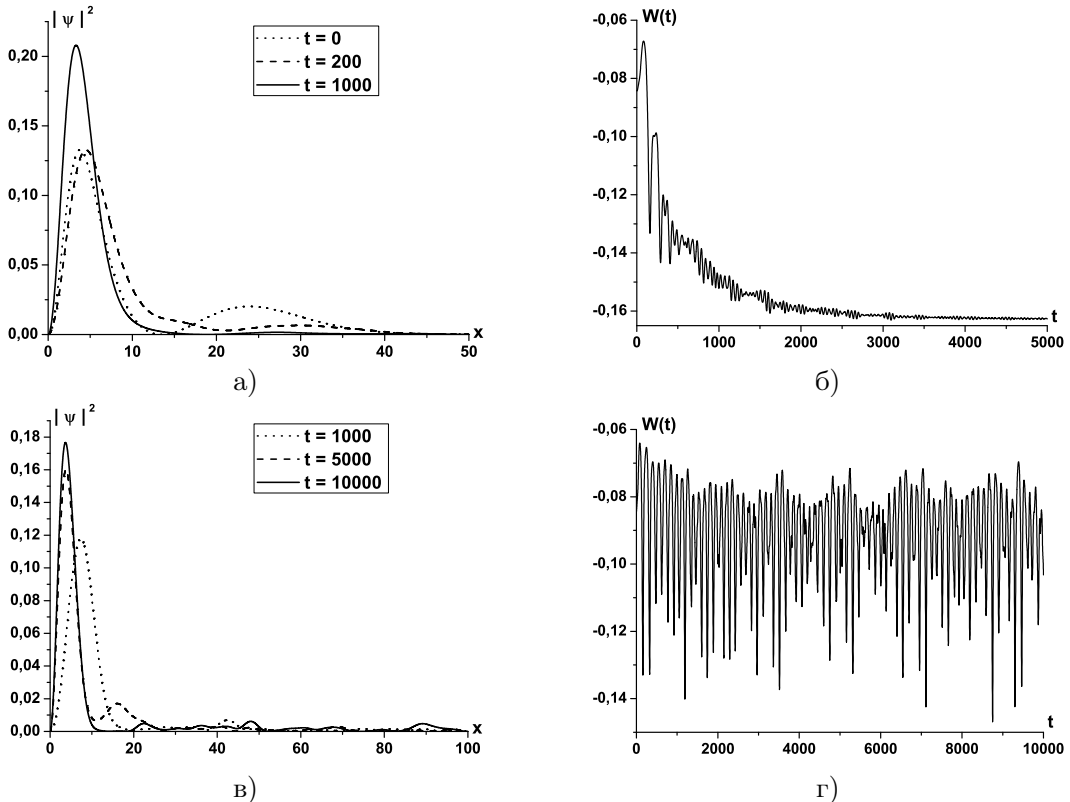


Рис. 2. Эволюция полярона из состояния (6) и соответствующая энергия электрона $W(t)$ при $\gamma = 4$ (а, б) и $\gamma = 0$ (в, г)

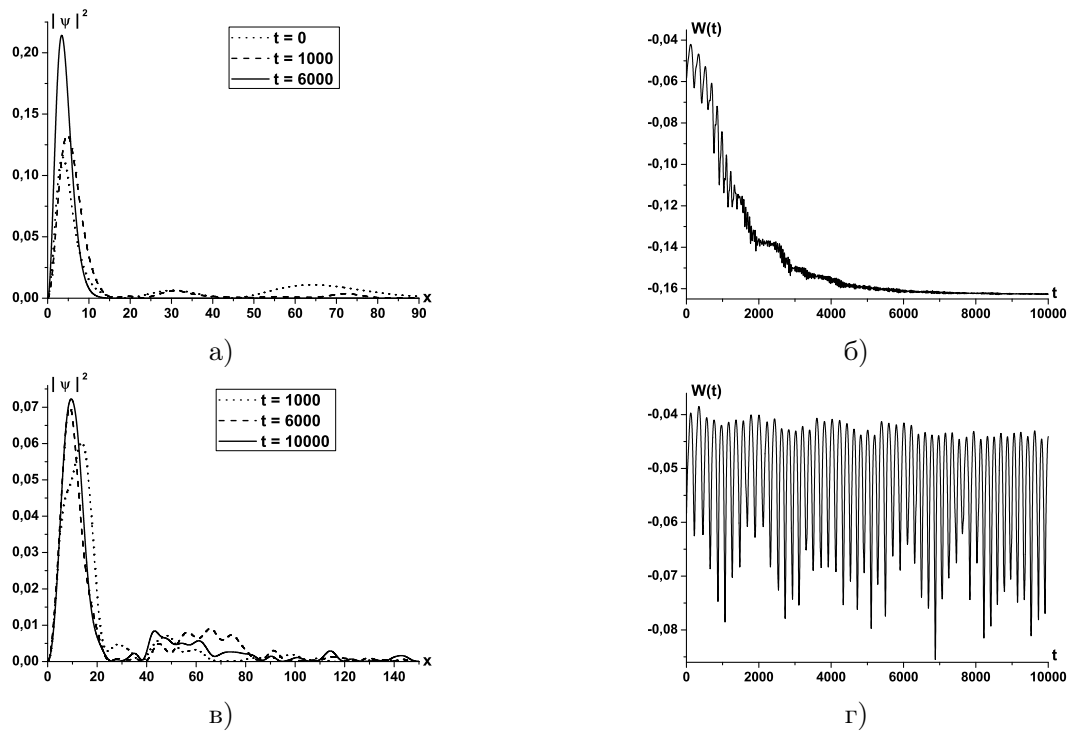


Рис. 3. Эволюция полярона из состояния (7) и соответствующая энергия электрона $W(t)$ при $\gamma = 4$ (а, б) и $\gamma = 0$ (в, г)

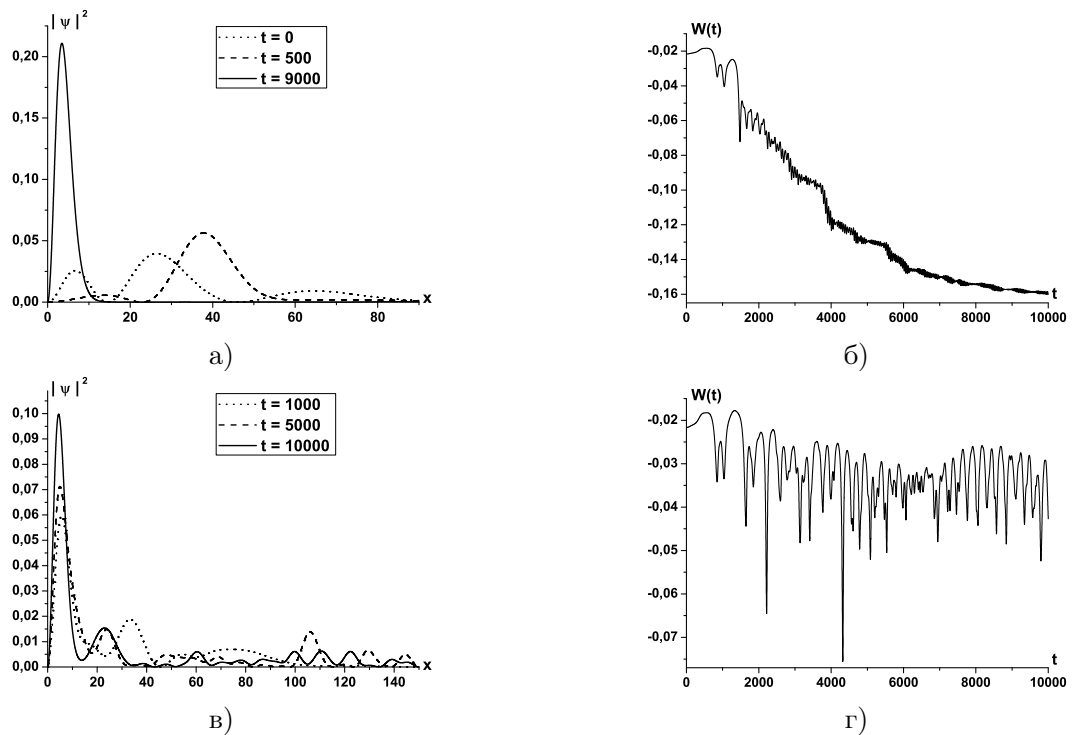


Рис. 4. Эволюция полярона из состояния (8) и соответствующая энергия электрона $W(t)$ при $\gamma = 4$ (а, б) и $\gamma = 0$ (в, г)

На основании проведённого численного моделирования можно заключить, что начальные распределения заряда, заданные суперпозициями (6), (7), (8), при наличии в системе затухания ($\gamma \neq 0$), с течением времени эволюционируют в основное состояние. При отсутствии в системе затухания в промежутке времени $0 \leq t < 10^5$ эволюция в основное состояние не наблюдается.

Время эволюции полярона в основное состояние при $\gamma \neq 0$ зависит от типа комбинации начального состояния. Так, для начального условия в форме (6) время эволюции в основное состояние составляет $t \approx 3000$, для (7) и (8) — соответственно $t \approx 6000$ и $t \approx 9000$.

Литература

1. Пекар С. И. Исследования по электронной теории кристаллов. — М.: Гостехиздат, 1951.
2. Давыдов А. С. Солитоны в молекулярных системах. — Киев: Наукова Думка, 1988.
3. Polarons and Applications / Ed. by V. D. Lakhno. — Wiley, Chichester, 1994.
4. Компьютеры и суперкомпьютеры в биологии / под ред. В. Д. Лахно, М. Н. Устинин. — Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002.
5. Давыдов А. С., Энольский В. З. Трёхмерный солитон в ионном кристалле // ЖЭТФ. — 1981. — Т. 81, № 3(9). — С. 1088–1098.
6. Lakhno V. D. Dynamical Polaron Theory of the Hydrated Electron // Chemical Physics Letters. — 2007. — Vol. 437. — Pp. 198–202.
7. Пузынин И. В. и др. Обобщённый непрерывный аналог метода Ньютона для численного исследования некоторых нелинейных квантово-полевых моделей // ЭЧАЯ. — 1999. — Т. 30, № 1, вып. 21. — С. 210–262.
8. Самарский А. А. Теория разностных схем. — М.: Наука, 1989. — С. 296–299.
9. Амирханов И. В. и др. Численное исследование динамики поляронных состояний // Вестник ТвГУ, серия «Прикладная математика». — 2009. — № 2[13]. — С. 5–14.

UDC 519.633, 538.9

Modeling of the Evolution of the Polaron States

I. V. Amirkhanov*, E. V. Zemlyanaya*, V. D. Lakhno[†], D. Z. Muzafarov*,
I. V. Puzynin*, T. P. Puzynina*, Z. A. Sharipov*

* Laboratory of Information Technologies
Joint Institute for Nuclear Research
Joliot-Curie 6, 141980 Dubna, Moscow region, Russia

[†] Institute of mathematical problems of biology
Russian Academy of Sciences
Institutskaja str., 4, 142290, Pushchino, Moscow Region, Russia

The evolution of polaron in a homogeneous environment is analyzed depending on parameters of the model and initial conditions which are selected in the form of various combinations of stationary polaron states. A computational scheme and results of the numerical modelling are presented. Work supported by RFBR grants 07-07-00313, 08-01-00800, 07-01-00738, 09-01-00770.

Key words and phrases: evolution of polaron, finite-difference scheme, numerical methods.