УДК 519.68 *Оригинальная статья*

# УЧЕТ ЭФФЕКТОВ ТУННЕЛИРОВАНИЯ ПРИ ВЫЧИСЛЕНИИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

И.Н. Беляева[1], Н.А. Чеканов[1], И.К. Кириченко[2], Н.Н. Чеканова[3]

[1]*ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»*

*308015, Россия, Белгород, ул. Победы, 85*

[2]*Национальный университет гражданской защиты Украины*

*61023,Украина, Харьков, ул. Чернышевская, 94*

[3]*Харьковский учебно-научный институт ГВУЗ «Университет банковского дела»,*

*61202, Украина, Харьков, пр. Победы, 55*

*chekanov@bsu.edu.ru*

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.291

**Аннотация:** Изложена общая схема метода интегрирования дифференциальных уравнений второго порядка в виде степенных рядов. Приведены результаты расчетов для уравнения Шредингера с потенциалами с двумя и тремя минимумами для квантовых ангармонических осцилляторов. Необходимая точность расчетов контролируется числом членов в степенных рядах и количеством знаков в мантиссе десятичных чисел. Показана структура расположения энергетических уровней и волновые функции.

*Ключевые слова: обыкновенное дифференциальное уравнение, энергетический спектр, волновая функция, обобщенные степенные ряды.*

В настоящее время объектами интенсивных экспериментальных и теоретических исследований являются, в частности, полупроводниковые наноструктуры. В них движение электронов (носителей электрического тока) ограничено и в результате существенно меняется большинство электронных свойств. Движение электронов в микроскопических полупроводниках подчиняется законам квантовой механики и описывается уравнением Шредингера с потенциалом, имеющим несколько локальных минимумов, разделенных барьерами с классически запрещенными областями движения, но возможными из-за квантового явления туннелирования [1-6].

В данной работе изложен метод интегрирования уравнения Шредингера в виде степенных рядов, предложенный ранее в работе [6], и приведены результаты расчетов для уравнения Шредингера с потенциалами с двумя и тремя минимумами для квантовых ангармонических осцилляторов. Представлен также алгоритм построения линейно независимых решений для одномерного уравнения Шредингера, с помощью которых определяется волновая функция [7-9].

В соответствии с этим методом для интегрирования уравнения Шредингера

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\,\psi(x)\,, \tag{1}$$

где $V(x)$ – потенциальная функция, $V(\pm\infty)=\infty$, $\psi(x)$ – квадратично интегрируемая функция на $(-\infty,\infty)$, $\psi(-\infty)=\psi(\infty)=0$, $E$ – собственные значения, вначале решается задача Коши для дифференциального уравнения

$$y''(x)+2\left[E-V(x)\right]y(x)=0 \tag{2}$$

с начальными данными

$$\begin{cases} y_1(x_0,E)=a, & a\neq 0, \\ y_1'(x_0,E)=0, & \end{cases} \quad \text{и} \quad \begin{cases} y_2(x_0)=b, & b\neq 0, \\ y_2'(x_0)=1, & \end{cases} \tag{3}$$

находятся два линейно независимых решения $y_1(x,E)$ и $y_2(x,E)$ в виде явных степенных рядов, в общем, с произвольным числом $N$ членов, и строится общее решение

$$y(x,E)=C_1y_1(x,E)+C_2y_2(x,E),\ C_1,C_2-const, \tag{4}$$

которое содержит величину $E$ как параметр.

В общем решении (4) содержится искомая собственная функция $\psi(x)$ уравнения Шредингера, которая с учетом граничных условий удовлетворяет следующей однородной линейной системе алгебраических уравнений

$$\begin{cases} C_1\cdot y_1(-\infty,E)+C_2\cdot y_2(-\infty,E)=0 \\ C_1\cdot y_1(+\infty,E)+C_2\cdot y_2(+\infty,E)=0 \end{cases}, \tag{5}$$

нетривиальное решение которой определяет спектр собственных значений $\{E_n\}\big|_{n=0}^{\infty}$ и функций $\{\psi_n(x)\}\big|_{n=0}^{\infty}$.

Разработана символьно-численная программа в среде Maple, реализующая изложенный выше метод решения уравнения Шредингера (1), и с ее помощью получены представленные результаты для следующих потенциалов

$$V(x)=\alpha\left(x^2-a^2\right)^2-px, \tag{6}$$

$$V(x)=Ax^2-Bx^4+Cx^6, \tag{7}$$

где $p$, $A>0,\ B>0,\ C>0$ – параметры.

Для уравнения Шредингера (1) с потенциалом (6) при значениях параметров $\alpha=0{,}8$ и $a=2$ в Таблице 1 и на рис. 1 приведен энергетический спектр в зависимости от параметра асимметрии $p$.

На рис. 1 при тех же значениях параметров потенциала приведен график зависимости значений энергетических уровней от параметра $p$, из которого видны избегнутые пересечения уровней энергии. Второе слагаемое в потенциале (6) описывает внешнее возмущение, амплитуда $p$ которого управляет положением как энергетических уровней, так и их избегнутых пересечений. На рис. 2 показана структура расположения энергетических уровней и волновые функции при величине амплитуды внешнего возмущения $p=1,25$.

Таблица 1. Энергетический спектр асимметричного ангармонического квантового осциллятора (1), (6) при $\alpha=0.8$, $a=2$ и $N=132$

| $n$ | $E_n$ | $p=0$ | $p=0,5$ | $p=1$ | $p=1,5$ | $p=2$ | $p=2,5$ | $p=3$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | $E_0$ | 2,4755 | 1,5126 | 0,5391 | -0,4444 | -1,4378 | -2,4406 | -3,4524 |
| 1 | $E_1$ | 2,4756 | 3,4274 | 4,3677 | 4,5380 | 3,6416 | 2,7340 | 1,8158 |
| 2 | $E_2$ | 7,1458 | 6,2932 | 5,4221 | 5,2959 | 6,2112 | 7,1130 | 6,7854 |
| 3 | $E_3$ | 7,1538 | 7,9906 | 8,8134 | 9,0991 | 8,3458 | 7,5735 | 8,0003 |
| 4 | $E_4$ | 11,0875 | 10,5361 | 9,8339 | 9,6185 | 10,3954 | 11,1298 | 11,1462 |
| 5 | $E_5$ | 11,3693 | 11,8720 | 12,3917 | 12,5787 | 12,2624 | 11,7751 | 11,9021 |
| 6 | $E_6$ | 13,8651 | 13,7634 | 13,5367 | 13,4745 | 13,7607 | 14,0467 | 14,1609 |

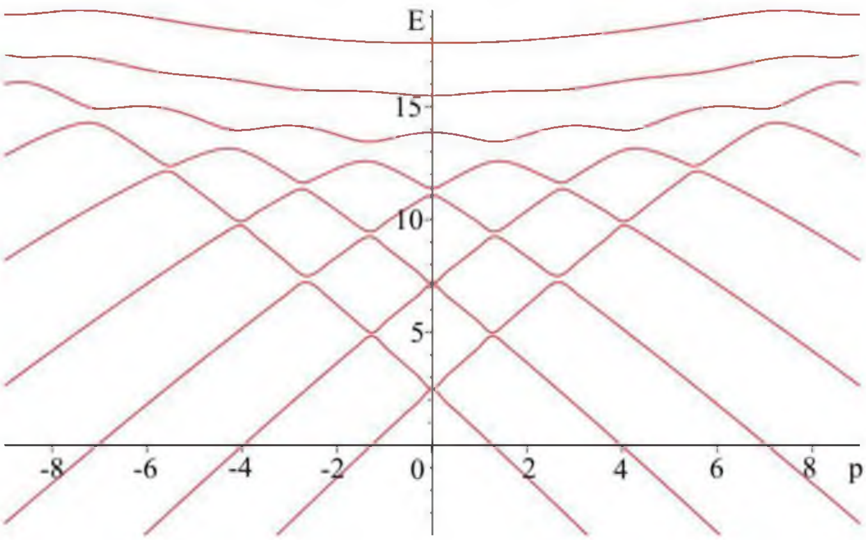
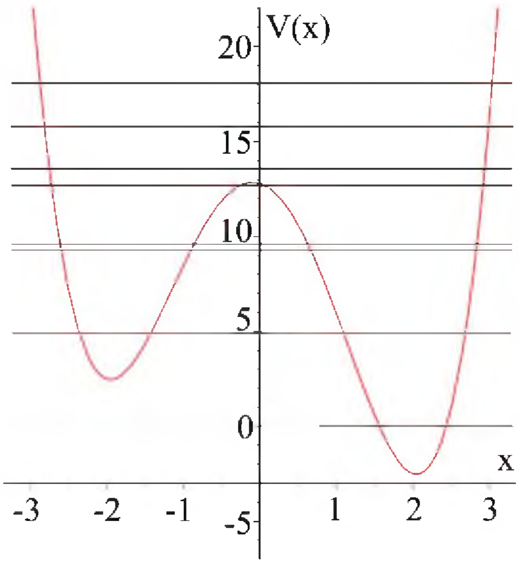



Рис. 1. Зависимость значений энергетических уровней от параметра $p$ асимметричного ангармонического осциллятора (1), (6).

Заметим, что для симметричного потенциала с двойной ямой (6) при $p=0$ величина расщепления между уровнями энергии основного ($n=0$) и первого возбужденного ($n=1$) состояний, полученная в нашей работе, равна $\Delta E=0,000066$, в то время как эта величина, вычисленная по формуле из работ [10, 11], равна $\Delta E=0,000070$.

При помощи той же программы для уравнения Шредингера (1) с потенциалом (7) найдены нижняя часть энергетического спектра и волновые функции в виде степенных рядов. Конкретные вычисления были проведены при следующих параметрах: $A=16,2$, $B=10,9$, $C=B^2/4A$ при которых потенциал имеет три локальных минимума. Значения уровней энергии приведены в Таблице 2, а структура их расположения изображена на рис. 3.



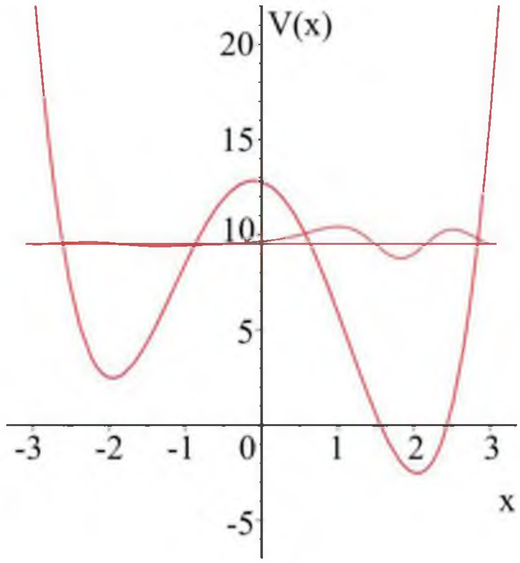




Рис. 2. Структура спектра (слева) и волновая функция пятого возбужденного уровня $E_5 = 9,4729$ (справа) для уравнения Шредингера (1) с потенциалом (6) при $p$ =1,25.

Таблица 2. Энергетический спектр симметричного ангармонического осциллятора (7) при $N = 220$.

| $n$ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $E_n$ | 2,5278 | 4,9156 | 5,0886 | 7,2667 | 10,4400 | 13,1899 | 16,4806 |

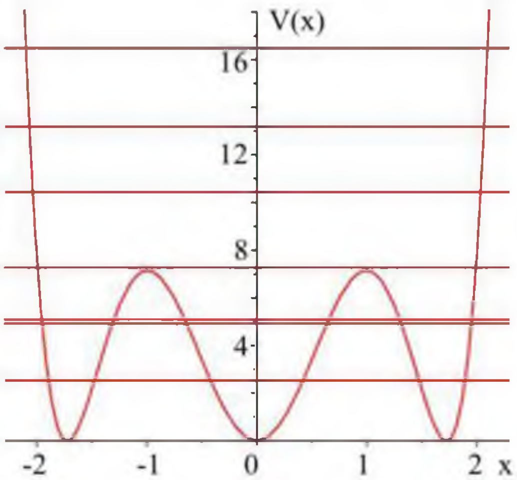



Рис. 3. Структура спектра в потенциале с тройной ямой (7).

Как видно, в симметричном потенциале с тройной ямой (7) избегнутое пересечение из-за квантового эффекта туннелирования наблюдается для первого и второго возбужденных уровней, чем существенно отличается от случая симметричного потенциала с двойной ямой, в котором избегнутое пересечение имеет место для основного и первого возбужденного состояний. В самом деле, из численных расчетов волновых функций (см. рис. 4) следует, что избегнутое пересечение уровней случается именно для первых двух возбужденных состояний, в которых, соответственно, их волновые функции обращаются в нуль один и два раза, а волновая функция основного состояния узлов не имеет.

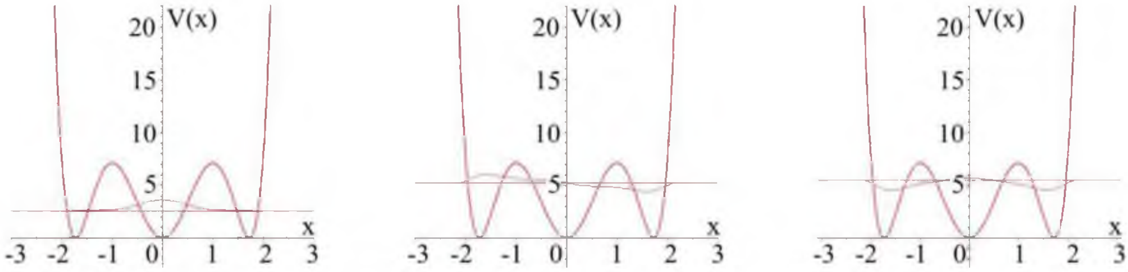



Рис. 4. Волновые функции основного, первого и второго возбужденных состояний, соответственно, с уровнями энергии $E_0 = 2,5278$, $E_1 = 4,9156$, $E_2 = 5,0886$.

## Заключение

В работе описан метод символьно-численного решения одномерного уравнения Шредингера с потенциалами, имеющими два или три локальных минимумами. При различных значениях параметров потенциалов вычислены уровни энергии и соответствующие волновые функции. В многоямных потенциалах, как известно, имеет место явление квантового туннелирования [12], которое приводит, в частности, к расщеплению энергетических уровней В работе выявлена сильная зависимость поведения волновой функции от точности вычисленного уровня энергии. Обнаружено явление квазипересечений уровней (так называемых избегнутых пересечений, когда расстояния между уровнями становится порядка $10^{-6-7}$) в зависимости от параметра внешнего возмущения. Вычисленное Поведение квазипересечений хорошо согласуется с результатами, полученными другими авторами на основе теории и приложений уравнений класса Гойна [13]. Существенной особенностью наших расчетов является контроль высокой точности вычисления значений энергетических уровней.

## Библиографический список:

1. **Демиховский, В.Я.** Физика квантовых низкоразмерных структур / В.Я. Демиховский. – М.: Логос, 2000. – 248 с.
2. **Давыдов, А.С.** Квантовая механика / А.С.Давыдов. – М.: Наука, 1973. – 704с.
3. **Шрёдингер, Э.** Избранные труды по квантовой механике / Э. Шрёдингер.– М.: Наука, 1976. – 422 с.
4. **Belyaeva, I.N.** A symbolic-numeric approach for solving the eigenvalue problem for the one-dimensional Schrödinger equation / I.N. Belyaeva, N.A. Chekanov, A.A. Gusev, V.A. Rostovtsev, S.I. Vinitsky // In: Computer Algebra in Scientific Computing. CASC 2006. Lecture Notes in Computer Science; ed. by V.G. Ganzha, E.W. Mayr, E.V. Vorozhtsov.

– Springer, Berlin, Heidelberg, 2006. – V. 4194. – P. 23-32.
5. **Беляева, И.Н.** Метод решения одномерного уравнения Шредингера при помощи степенных рядов / И.Н. Беляева, Н.А. Чеканов // Вестник Тамбовского государственного университета. –2006. – Т. 11. – Вып. 2. – С. 168-171.
6. **Беляева, И.Н.** Аналитически-численный метод решения краевой задачи уравнения Шредингера /И.Н. Беляева, И.А. Кузнецова, Н.А. Чеканов // Вестник Херсонского университета.– 2006. – Вып. 2(25) – С. 40-46.
7. **Трикоми, Ф.** Дифференциальные уравнения /Ф. Трикоми. – М.: Издательство иностранной литературы, 1962. – 352 с.
8. **Van derStraeten, E.** The quantum doble-well anharmonic oscillator in external field/ E. Van der Straeten, J. Naudts //Journal of Physics A: Mathematical and General. – 2006. – V. 39. – № 4. –P. 933-940.
9. **Чеканов, Н.А.** Символьно-численные методы решения дифференциальных уравнений классической и квантовой механики / Н.А. Чеканов, И.Н. Беляева, И.К. Кириченко, Н.Н. Чеканова. – Харків: «ІСМА», 2019. – 420 с.
10. **Khuat-duy, D.** Multiresonance tunneling effect in double-well potentials / D. Khuat-duy, P. Leboeuf // Applied Physics Letters. – 1993. – V. 63. – I. 14. – P. 1903-1905.
11. **Альберио, С.** О формулах для расщепления верхних и нижних энергетических уровней одномерного оператора Шредингера / С. Альберио, С.Ю. Доброхотов, Е.С. Семенов // Теоретическая и математическая физика. – 2004 – Т. 141 – № 3. – С. 116-126.
12. **Ландау, Л.Д.** Теоретическая физика: Учебное пособие для вузов. В 10 т. Т. III: Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – 4-е изд., испр. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. –768 с.
13. **Славянов, С.Ю.** Специальные функции: Единая теория, основанная на анализе особенностей / С.Ю. Славянов, В. Лай. – СПб.: Невский Диалект, 2002. – 312 с.

## References:

1. **Demikhovskij, V.Ya.** Physics of quantum low-dimensional structures / V.Ya. Demikhovskij. – M.: Logos, 2000. – 248 p. (In Russian).
2. **Davydov, A.S.** Quantum mechanics / A.S. Davydov. – M.: Nauka, 1973. – 704 p. (In Russian).
3. **Schrödinger, E.** Selected works on quantum mechanics / E. Schrödinger. – M.: Nauka, 1976. – 422 p. (In Russian).
4. **Belyaeva, I.N.** A symbolic-numeric approach for solving the eigenvalue problem for the one-dimensional Schrödinger equation / I.N. Belyaeva, N.A. Chekanov, A.A. Gusev, V.A. Rostovtsev, S.I. Vinitsky // In: Computer Algebra in Scientific Computing. CASC 2006. Lecture Notes in Computer Science; ed. by V.G. Ganzha, E.W. Mayr, E.V. Vorozhtsov. – Springer, Berlin, Heidelberg, 2006. – V. 4194. – P. 23-32.
5. **Belyaeva, I.N.** Method for solving the one-dimensional Schrödinger equation using power series / I.N. Belyaeva, N.A. Chekanov // Vestnik Tambovskogo gosudarstvennogo universiteta. – 2006. – V. 11. – I. 2. – P. 168-171. (In Russian).
6. **Belyaeva, I.N**. Analytical-numerical method for solving the boundary value problem of the Schrödinger equation / I.N. Belyaeva, I.A. Kuznetsova, N.A. Chekanov // Vestnik Khersonskogo universiteta. – 2006. – I. 2(25) – P. 40-46. (In Russian).
7. **Trikomi, F.** Differential equations / F. Trikomi. – M.: Izdatel'stvo inostrannoj literatury, 1962. – 352 352p. (In Russian).

8. **Van derStraeten, E.** The quantum doble-well anharmonic oscillator in external field/ E. Van der Straeten, J. Naudts //Journal of Physics A: Mathematical and General. – 2006. – V. 39. – № 4. –P. 933-940.
9. **Chekanov, N.A.** Symbol-numerical methods for solving differential equations of classical and quantum mechanics / N.A. Chekanov, I.N. Belyaeva, I.K. Kirichenko, N.N. Chekanova. – Kharkiv: «ISMA», 2019. – 420 p. (In Russian).
10. **Khuat-duy, D.** Multiresonance tunneling effect in double-well potentials / D. Khuat-duy, P. Leboeuf // Applied Physics Letters. – 1993. – V. 63. – I. 14. – P. 1903-1905.
11. **Albeverio, S.** Splitting formulas for the higher and lower energy levels of the one-dimensional Schrödinger operator / S. Albeverio, S.Yu. Dobrokhotov, E.S. Semenov // Theoretical and Mathematical Physics. – 2004, – V. 141. – I. 1. – P. 98-106.
12. **Landau, L.D.** Theoretical Physics: Textbook for universities. In 10 vol. V. III: Quantum mechanics (nonrelativistic theory) / L.D. Landau, E.M. Lifshits. – 4-e izd., ispr. – M.: Nauka. Gl. red. fiz.-mat. lit., 1989. –768 p. (In Russian).
13. **Slavyanov, S.Yu**. Special functions: Unified theory based on the analysis of features / S.Yu. Slavyanov, V. Laj. – SPb.: Nevskij Dialekt, 2002. – 312 p. (In Russian).

*Original paper*

**ACCOUNTING OF TUNNELING EFFECTS WHEN CALCULATING THE ENERGY SPECTRUM OF THE SCHRÖDINGER EQUATION**

I.N. Belyaeva[1], N.A. Chekanov[1], I.K. Kirichenko[2], N.N. Chekanova[3]
[1]*Belgorod National Research University, Belgorod, Russia*
[2]*National University of Civil Defence of Ukraine, Kharkiv, Ukraine*
[3]*Kharkiv Educational and Research Institute of the Higher Educational Institution «University of Banking», Kharkiv, Ukraine*

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.291

**Abstract:** The general scheme of the method for integrating second-order differential equations in the form of power series is presented. The obtained results for the Schrödinger equation with potentials with two and three minima for quantum anharmonic oscillators are presented. The necessary accuracy of calculations is controlled by the number of terms in the power series and the number of digits in the mantissa of decimal numbers. The structure of the energy levels and wave functions are shown.

*Keywords: ordinary differential equation, energy spectrum, wave function, generalized power series.*

*Беляева Ирина Николаевна – к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедры информатики, естественнонаучных дисциплин и методики преподавания, ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»*
*Чеканов Николай Александрович – д.ф.-м.н., профессор, профессор* кафедры *дифференциальных уравнений, ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»*
*Кириченко Игорь Константинович – д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры физико-математических дисциплин Национального университета гражданской защиты Украины*
*Чеканова Наталья Николаевна – к.ф-м.н., доцент, доцент кафедры* информационных технологий *Харьковского учебно-научного института ГВУЗ «Университет банковского дела»*

*Irina N. Belyaeva – Ph. D, Docent, Department of Computer Science, Natural Sciences and Teaching Methods, Belgorod National Research University*
*Nikolai A. Chekanov –Dr. Sc., Professor, Department of Computer Science, Natural Sciences and Teaching Methods, Belgorod National Research University*
*Igor K. Kirichenko – Dr. Sc., Professor, Department of physical and mathematical sciences, National University of Civil Defence of Ukraine*
*Natalia N. Chekanova – Ph. D, Docent, Department of Information Technology Kharkiv Educational and Research Institute of the Higher Educational Institution «University of Banking»*

Поступила в редакцию/received: 01.09.2019; после рецензирования/revised: 12.10.2019; принята/accepted 04.11.2019.