

# Численный анализ динамической модели полярона

И.В. Амирханов<sup>1</sup>, Е.В. Земляная<sup>1</sup>, В.Д. Лахно<sup>2</sup>, Д.З. Музафаров<sup>1</sup>, И.В. Пузынин<sup>1</sup>,  
Т.П. Пузынина<sup>1</sup>, З.А. Шарипов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>e-mail: camir@jinr.ru, Лаборатория информационных технологий, ОИЯИ, Дубна; <sup>2</sup>Институт математических проблем биологии РАН, Пущино

На протяжении более двух десятилетий в ЛВТА-ЛИТ ОИЯИ в сотрудничестве с ИМПБ РАН ведется исследование нелинейных самосогласованных задач, возникающих в различных приложениях теории конденсированных состояний. Особое место среди различных явлений автолокализации квазичастиц (экситонов или электронов) занимает автолокализованное состояние электронов в ионных кристаллах, называемое поляроном. Поляроны определяют многие процессы в ионных кристаллах [1], полупроводниках, полярных жидкостях и биологических системах [2-4]. Понятие биполяронных состояний играет важную роль при объяснении высокотемпературной сверхпроводимости. 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 поляроны являются основными носителями тока. Их проводящие свойства используются при создании сверхлегких проводников и аккумуляторов. В биологии поляроны или солитоны объясняют возможность переноса энергии на большое расстояние. Их изучение дает основу для создания таких качественно новых устройств наноэлектроники, как нанобиочипы и электронные нанобиосенсоры.

Динамическая модель полярона описывается системой связанных квантово-классических динамических уравнений [5, 6], стационарные решения которой исследовались многими авторами (см., в частности, обзор [7] и цитируемую литературу). Наша цель состояла в изучении временной эволюции различных начальных состояний полярона в отсутствие и при наличии трения. Ниже математическая постановка задачи, представлена численная схема для решения системы нелинейных дифференциальных уравнений, описывающей эволюцию полярона в однородной среде, представлены результаты численного моделирования, полученные в [8].

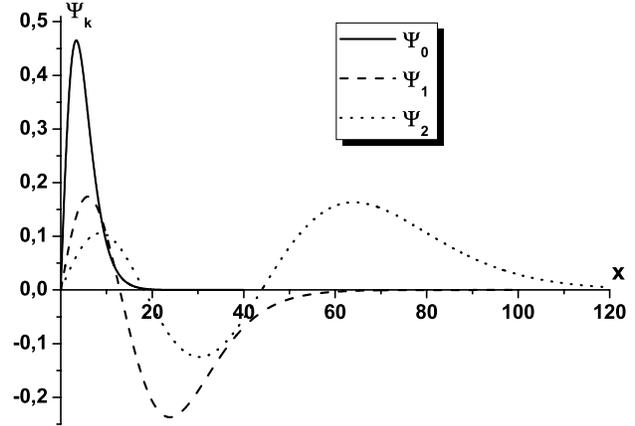


Рис. 1: Собственные функции системы (3)

## Математическая постановка задачи

Система нелинейных уравнений для описания эволюции полярона предложена в [5]. Для сферически симметричного неподвижного полярона с учетом трения [6] эта система записывается в следующем виде:

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

где  $\psi$  – волновая функция,  $\varphi$  – потенциал,  $\Theta$ ,  $\bar{m}$ ,  $\gamma$ ,  $\omega$ ,  $\bar{\varepsilon}$  – безразмерные параметры модели. Система (1) дополняется следующими начальными и граничными условиями:

$$\psi(x, t)|_{t=0} = \Psi_k(\cos(\lambda_k \pi/4) + i \sin(\lambda_k \pi/4)),$$

$$\Theta(x, t)|_{t=0} = -\frac{1}{\bar{\varepsilon}} \frac{\Psi_k^2}{x}, \quad \frac{\partial}{\partial t} \Theta(x, t) \Big|_{t=0} = 0,$$

$$\varphi(0) = 0, \quad \varphi'(\infty) = 0.$$

(2)

Здесь  $\lambda_k$  и  $\Psi_k$  – собственные значения и собственные функции соответствующей стационарной за-

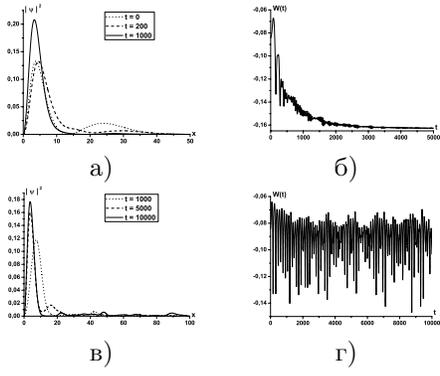


Рис. 2: Эволюция полярона из состояния (6) и соответствующая энергия электрона  $W(t)$  при  $\gamma = 4$  (а, б) и  $\gamma = 0$  (в, г)

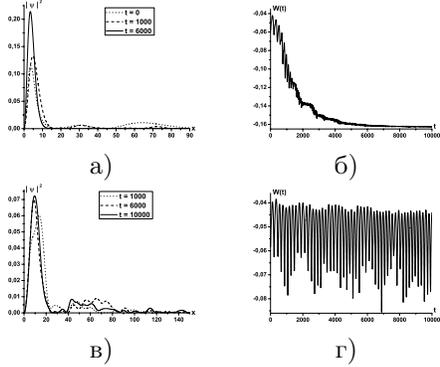


Рис. 3: Эволюция полярона из состояния (7) и соответствующая энергия электрона  $W(t)$  при  $\gamma = 4$  (а, б) и  $\gamma = 0$  (в, г)

дачи:

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

с граничными условиями и с условием нормировки:

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

На основе непрерывного аналога метода Ньютона [7] находим решения  $\{\Psi_k, \lambda_k\}$  с числом узлов  $k = 0, 1, 2, \dots$ . На Рис. 1 показаны первые три собственные функции системы (3), (4). Соответствующие собственные значения равны  $\lambda_0 = -0,16277$ ,  $\lambda_1 = -0,0308$ ,  $\lambda_2 = -0,0125$  ( $\bar{m} = 1$ ,  $\bar{\varepsilon} = 1$ ).

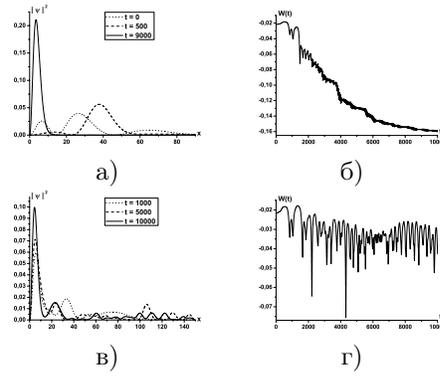


Рис. 4: Эволюция полярона из состояния (8) и соответствующая энергия электрона  $W(t)$  при  $\gamma = 4$  (а, б) и  $\gamma = 0$  (в, г)

## Вычислительная схема

Введем 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 неявную конечно-разностную схему порядка аппроксимации  $O(h_t + h_x^2)$  [9]:

$$\begin{cases} \frac{\psi_m^{n+1} - \psi_m^n}{h_t} = i \left\{ \sigma \left[ \Lambda^{n+1} + \frac{\varphi_m^{n+1}}{mh_x} \psi_m^{n+1} \right] + \right. \\ \left. + (1 - \sigma) \left[ \Lambda^n + \frac{\varphi_m^n}{mh_x} \psi_m^n \right] \right\} \\ \frac{\varphi_{m+1}^{n+1} - 2\varphi_m^{n+1} + \varphi_{m-1}^{n+1}}{h_x^2} = \Theta_m^{n+1} \\ \frac{\Theta_m^{n+1} - 2\Theta_m^n + \Theta_m^{n-1}}{h_t^2} + \gamma \frac{\Theta_m^{n+1} - \Theta_m^n}{h_t} + \\ + \omega^2 \Theta_m^{n+1} = -\frac{\omega^2 |\psi_m^n|^2}{\bar{\varepsilon} mh_x}, \end{cases} \quad (5)$$

$$\Lambda^{n+1} = \frac{\psi_{m+1}^{n+1} - 2\psi_m^{n+1} + \psi_{m-1}^{n+1}}{2\bar{m}h_x^2}$$

$$\Lambda^n = \frac{\psi_{m+1}^n - 2\psi_m^n + \psi_{m-1}^n}{2\bar{m}h_x^2}$$

$$\psi_m^0 = \Psi_k(\cos(\lambda_k \pi/4) + i \sin(\lambda_k \pi/4));$$

$$\Theta_m^{-1} = -\frac{1}{\bar{\varepsilon}} \frac{|\psi_m^0|^2}{mh_x}; \quad \Theta_m^0 = \Theta_m^{-1};$$

$$\varphi_0^n = 0; \quad \varphi_l^n = \varphi_{l-1}^n; \quad m = 1, 2, \dots, l; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

где  $\sigma = 0, 5$ ,  $\Psi_k, \lambda_k$  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  $\psi^n$  относительно  $\Theta^{n+1}$ ;
2. Решается второе уравнение для найденного  $\Theta^{n+1}$ , определяется  $\varphi^{n+1}$ ;
3. Решается первое уравнение и вычисляется  $\psi^{n+1}$  на следующем временном слое;
4. Переход к п.1 для следующего значения  $n$ .

Тестирование вычислительной схемы (5) проводилось с помощью модельных расчетов для уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом, которое совпадает с первым уравнением системы (1) при  $\varphi = 1$ . В этом случае для уравнения Шредингера известны аналитические решения. По результатам сравнительного анализа численных и аналитических решений уравнения Шредингера 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:

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

Поскольку расчеты велись в безразмерных единицах, энергия  $W(t)$  здесь также является безразмерной величиной.

### Результаты численного моделирования

Численные эксперименты показали, что если в качестве начального условия (2) взято стационарное состояние полярона, полученное путем численного решения задачи (3), (4), форма полярона со временем не меняется. В [8] исследовалась эволюция начальных поляронных состояний, заданных в форме комбинаций стационарных состояний полярона:

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

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

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

Здесь  $N$  – нормировочная константа,  $\Psi_{0,1,2}$  – волновые функции основного состояния, первого и второго возбужденных 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.

На основании проведенного 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  $t \approx 9000$ .

### Список литературы

- [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] Lakhno V.D. (ed.). Polarons and Applications. Wiley, Chichester, 1994.
- [4] Компьютеры и суперкомпьютеры в биологии. Под ред. Лакно В.Д. и Устинина М.Н. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002, 528с.
- [5] Давыдов А.С., Энольский В.З. Трехмерный солитон в ионном кристалле. // ЖЭТФ, т. 81, вып. 3(9), 1981, с.1088-1098.
- [6] Lakhno V.D. Dynamical polaron theory of the hydrated electron. // Chemical Physics Letters, 2007, Vol. 437, с.198-202.
- [7] Пузынин И.В. и др. Обобщенный непрерывный аналог метода Ньютона для численного исследования некоторых нелинейных квантово - полевых моделей. // ЭЧАЯ, т. 30, вып. 1, 1999, стр. 210-262.
- [8] Амирханов И.В. и др. Численное исследование динамики поляронных состояний. // Вестник ТвГУ, серия Прикладная математика, 2009, Вып. 2[13], с.5-14.
- [9] Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989, стр. 296-299.