

## МОДЕЛИ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

УДК 519.633, 538.9

### ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ПОЛЯРОННЫХ СОСТОЯНИЙ

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

\* Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория  
информационных технологий

\*\* Институт математических проблем биологии РАН

---

*Поступила в редакцию 22.12.2008, после переработки 29.12.2008.*

---

В работе исследована численная схема для решения системы нелинейных дифференциальных уравнений, описывающей эволюцию полярона в однородной среде. Выполнен анализ точности схемы вычислений. По результатам вычислительных экспериментов сделан вывод, что если в начальный момент времени полярон находился в конкретном состоянии (основном и возбужденном), то он сохраняется в этом состоянии независимо от наличия или отсутствия затухания в системе. Показано, что начальные распределения заряда, заданные суперпозициями при наличии в системе затухания с течением времени эволюционируют в основное состояние. При отсутствии в системе затухания эволюция в основное состояние не наблюдается.

A numerical scheme for solving a system of the nonlinear differential equations describing the evolution of the polaron in a homogeneous environment has been investigated. An accuracy of the computational scheme is analyzed. The obtained results allows us to conclude that if in an initial state the polaron was in a particular state (basic or excited one), it remains in this state irrespective of the presence or absence of damping in the system. It is shown that the initial charge distributions given by some superpositions at presence in the system of damping eventually evolve to a basic state. No evolution to a basic state is observed at the absence of damping in the system.

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

**Keywords:** numerical methods, finite-difference scheme, polaron, evolution of polaron.

## 1. Введение

Моделирование ряда физических процессов в конденсированных средах проводится в терминах автолокализованных состояний. Среди различных явлений автолокализации квазичастиц (экситонов или электронов) в кристаллах особое место занимает автолокализация электронов в ионных кристаллах. Такое автолокализованное состояние было названо поляроном.

Идея автолокализации электрона в идеальном ионном кристалле впервые была высказана Л.Д. Ландау, затем разрабатывалась С.И. Пекаром, С.В. Тябликовым, Г. Фролихом и др. (см. [1, 2] и цитируемую литературу). Автолокализация полярона обусловлена кулоновским взаимодействием электрона с векторным полем поляризации, возникающем в кристалле под влиянием того же электрона. Такая локальная поляризация эквивалентна потенциальной яме для электрона, в которой он находится в основном либо одном из возбужденных состояний с дискретной энергией и своим средним полем поддерживает поляризацию кристаллической решетки. Это автолокализованное состояние является трехмерным нетопологическим солитоном в ионных кристаллах. Исследование таких структур (в том числе, изучение их эволюции и устойчивости) актуально для выяснения общих условий образования нетопологических солитонов в трехмерных системах. Кроме того, изучение динамики полярона представляет несомненный интерес для понимания механизмов переноса заряда и энергии в различных физических, химических и биологических системах [3, 4].

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,  $\Omega$  – частота оптических колебаний ионов,  $\gamma$  – 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. В настоящей работе мы ограничиваемся случаем неподвижного полярона ( $v = 0$ ). В дальнейшем будет исследоваться случай, когда полярон движется с определенной скоростью ( $v \neq 0$ ).

Поскольку проведение натуральных экспериментов в этой области сопряжено с большими трудностями, а в некоторых случаях технически просто невозможно, особенно важную роль приобретает проведение вычислительных экспериментов. При этом исследовать эволюцию начальных состояний нужно в промежутке  $0 \leq t \leq T$ , где параметр  $T$  из физических соображений должен быть достаточно большой величиной. Это обстоятельство предъявляет особые требования к методам численного исследования исходной системы, гарантирующим точностные характеристики решения в промежутке  $0 \leq t \leq T$ .

В настоящей 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.

### 1. Постановка задачи

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

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

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

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

Здесь  $\lambda_k$  и  $\Psi_k$  – 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:

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

Решая систему (3) - (4) методом НАМН [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 возбужденного состояния и т.д. На *рис. 1* показаны первые три собственные функции системы (3) - (4). Соответствующие собственные значения равны  $\lambda_0 = -0,16277$ ,  $\lambda_1 = -0,0308$ ,  $\lambda_2 = -0,0125$  ( $\bar{m} = 1$ ,  $\tilde{\varepsilon} = 1$ ).

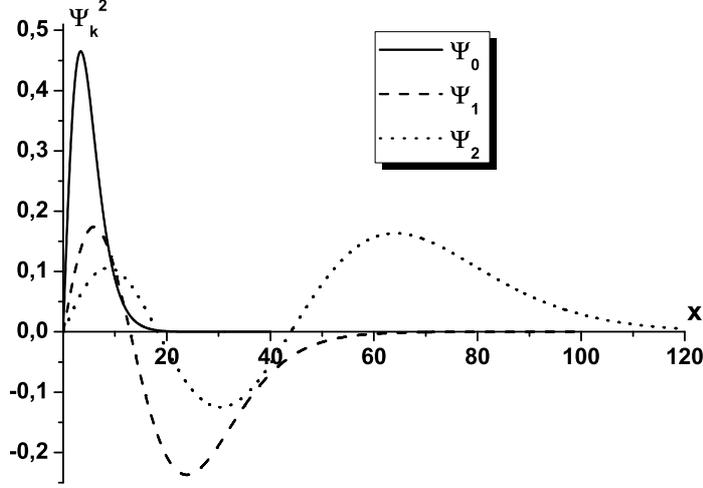


Рис. 1: Собственные функции системы (3).

## 2. Метод численного решения

Введем равномерную сетку по переменным в системе (1), т.е. положим

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

$h_x, h_t$  – соответственно шаги по переменным  $x$  и  $t$ . 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]:

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

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

Для решения задачи (1)-(2) по схеме (5) на каждом слое с номером  $n$  использовали 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. Повторяется весь алгоритм.

### 3. Проверка численной схемы

Тестирование вычислительной схемы (5) проводилось с помощью модельных расчетов для уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом, которое совпадает с первым уравнением системы (1) при  $\varphi = 1$ . Этот подход обусловлен тем, что в этом случае для уравнения Шредингера можно написать точные аналитические решения и провести их сравнительный анализ с численными результатами. С другой стороны, физическая постановка задачи требует решать систему (1) для безразмерных значений  $t$  из интервала  $0 \leq t < 10^5$ , т.е. учет накопления ошибок с возрастанием  $t$  также играет немаловажную роль. По результатам проведенного сравнительного анализа численных и точных решений уравнения Шредингера выбирались значения шагов сетки  $h_x = 0,01$  и  $h_t = 0,001$ . При таком выборе шагов сетки максимальная абсолютная разность аналитического и численного решений не превышает значения  $4 \cdot 10^{-4}$  для  $0 \leq t < 10^5$  (рис. 2).

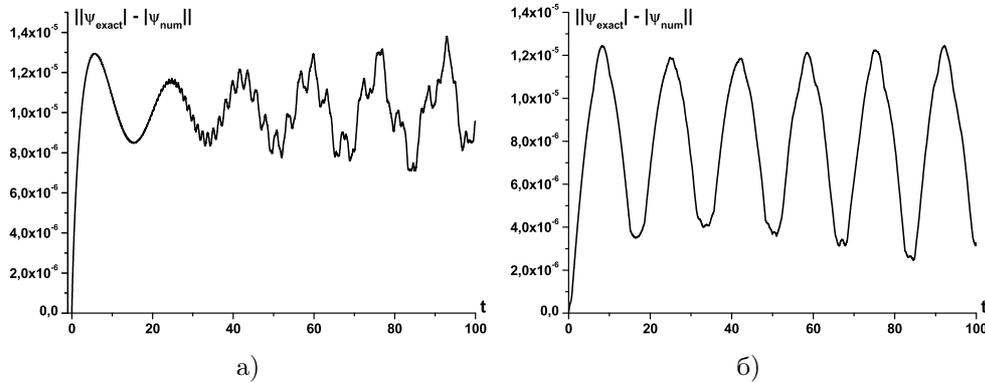


Рис. 2: Результаты сравнительного анализа численного и точного решений уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом: а) – для основного состояния, б) – для первого возбужденного состояния.

Для проверки точности схемы (5) проводился также численный эксперимент при фиксированном шаге  $h_t$  и на сгущающейся сетке по  $x$ , т.е. для  $h_x, h_x/2, h_x/4$  (в качестве начального условия выбиралась сумма нулевого состояния и первого возбужденного состояний). Получены следующие результаты:

$$\max_{0 \leq t \leq 100} \left| \frac{\psi_{h_x}(20, t) - \psi_{h_x/2}(20, t)}{(\psi_{h_x}(20, t) + \psi_{h_x/2}(20, t))/2} \right| \approx 1.8 \cdot 10^{-5}, \quad \text{при } t = 99.947,$$

$$\max_{0 \leq t \leq 100} \left| \frac{\psi_{h_x/2}(20, t) - \psi_{h_x/4}(20, t)}{(\psi_{h_x/2}(20, t) + \psi_{h_x/4}(20, t))/2} \right| \approx 6.02 \cdot 10^{-6}, \quad \text{при } t = 99.594.$$

Как видно, найденные относительные разности на сгущающейся сетке уменьшаются.

#### 4. Обсуждение полученных результатов

В данной работе приводятся первые результаты численного решения динамических уравнений полярона (1)-(2). Для визуализации численных результатов мы вычисляли величину  $W(t)$  по формуле:

$$W(t) = \frac{1}{2\bar{m}} \int \left| \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right|^2 dx - \int \frac{\varphi(x, t) |\psi(x, t)|^2}{x} dx. \quad (6)$$

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

На *рис. 3* показана эволюция полярона в случае, когда в качестве начального условия (2) было взято безузловое решение стационарной задачи (3)-(4). Как видно из рисунка, форма полярона со временем не меняется. Такие же результаты были получены, когда в качестве начальных условий для (1) были взяты решения (3)-(4) для первого и второго возбужденных состояний. Обобщив это, можно сказать, что если в (2) поставить решение соответствующей стационарной задачи (основной или возбужденной), то для значений  $t < 10^5$  данное состояние является при  $k = 0, 1, 2$  устойчивым.

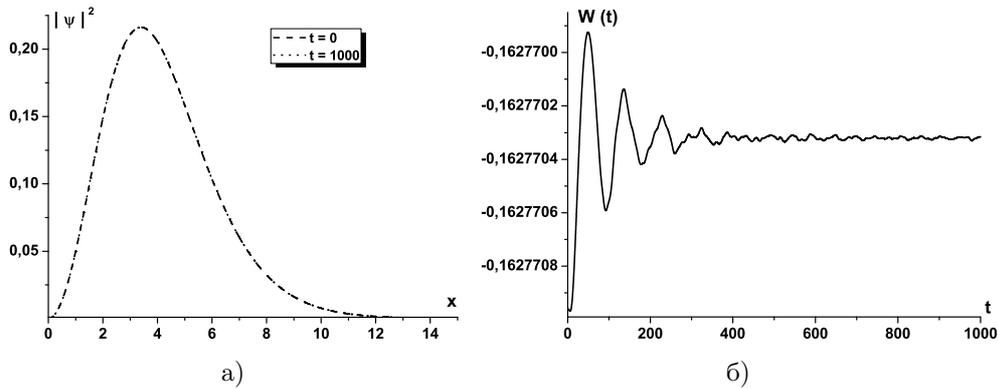


Рис. 3: Эволюция полярона (а) из основного состояния задачи (3)-(4) и соответствующая энергия электрона  $W(t)$  (б) при значениях  $\gamma = 0$  и  $\gamma = 4$ .

На *рис. 4* показана эволюция полярона в случае, когда начальные условия выбирались в виде комбинации двух состояний

$$\Psi(x, t)|_{t=0} = N \left[ \Psi_0 \exp\left(i\pi \frac{\lambda_0}{4}\right) + \Psi_1 \exp\left(i\pi \frac{\lambda_1}{4}\right) \right], \quad (7)$$

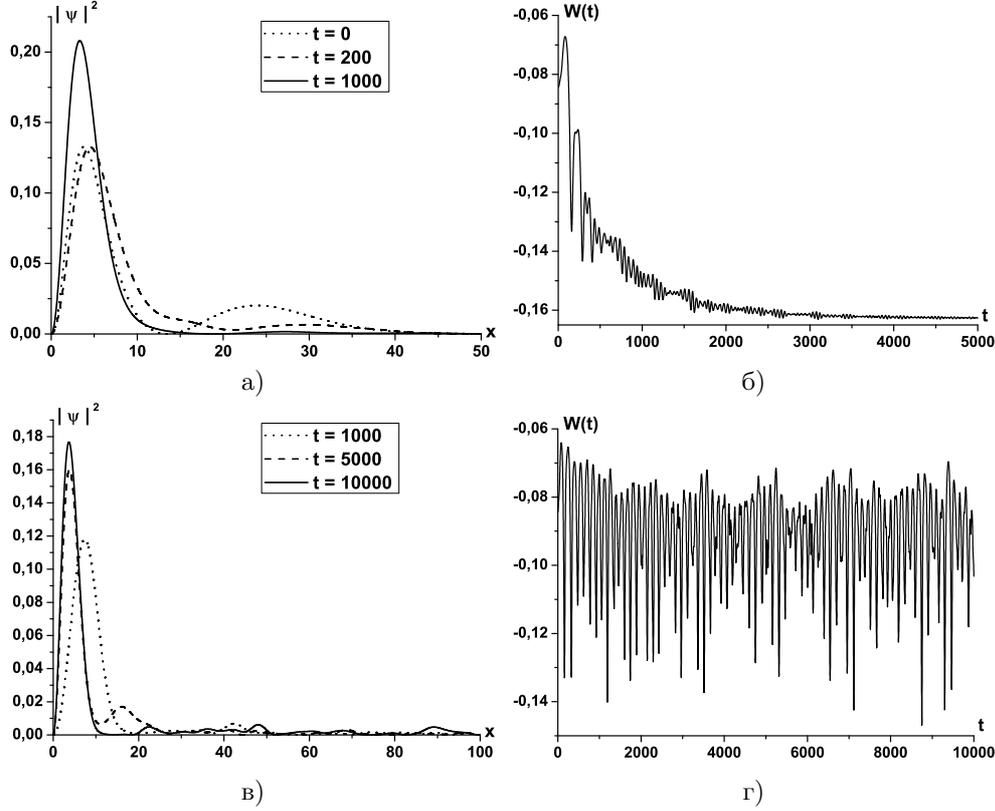


Рис. 4: Эволюция полярона из состояния (7) и соответствующая энергия электрона  $W(t)$  при коэффициентах трения  $\gamma = 4$  (а, б) и  $\gamma = 0$  (в, г).

где  $N$  – нормировочная константа,  $\Psi_0$  – волновая функция основного состояния,  $\Psi_1$  – волновая функция первого возбужденного состояния, при значениях параметров  $\bar{m} = 1$ ,  $\omega = 1$ ,  $\tilde{\varepsilon} = 1$ ,  $\gamma = 0$  и 4. Из рис. 4 следует, что начальное распределение заряда, заданное суперпозицией (7), с течением времени эволюционирует в основное состояние. Этот вывод является общим при наличии в системе затухания ( $\gamma \neq 0$ ). При  $\gamma = 0$  численные исследования показывают, что в промежутке времени  $0 \leq t < 10^5$  эволюция в основное либо возбужденное состояние не наблюдается.

Аналогичные выводы можно сделать из рис. 5 и рис. 6, где показана эволюция полярона из состояний

$$\Psi(x, t)|_{t=0} = N \left[ \Psi_0 \exp\left(i\pi \frac{\lambda_0}{4}\right) + \Psi_2 \exp\left(i\pi \frac{\lambda_2}{4}\right) \right], \quad (8)$$

$$\Psi(x, t)|_{t=0} = N \left[ \Psi_1 \exp\left(i\pi \frac{\lambda_1}{4}\right) + \Psi_2 \exp\left(i\pi \frac{\lambda_2}{4}\right) \right], \quad (9)$$

соответственно.

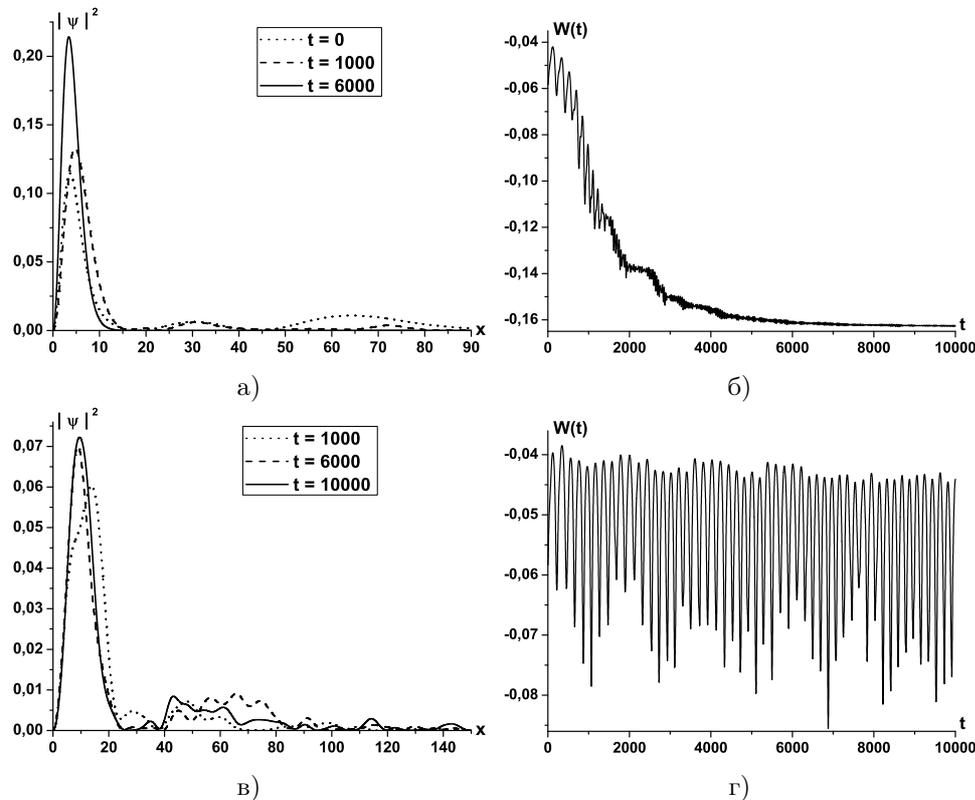


Рис. 5: Эволюция полярона из состояния (8) и соответствующая энергия электрона  $W(t)$  при коэффициентах трения  $\gamma = 4$  (а, б) и  $\gamma = 0$  (в, г).

## Закключение

В работе проведено численное исследование динамической модели полярона на основе системы нелинейных уравнений (1)-(2). Выполнен анализ точности схемы вычислений. По результатам вычислительных экспериментов можно сделать следующие выводы:

1. Показано, что если в начальный момент времени полярон находился в конкретном состоянии (основном и возбужденном), то для значений  $t < 10^5$  он сохраняется в этом состоянии независимо от наличия или отсутствия затухания в системе.
2. Начальные распределения заряда, заданные суперпозициями (7, 8, 9), при наличии в системе затухания 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.

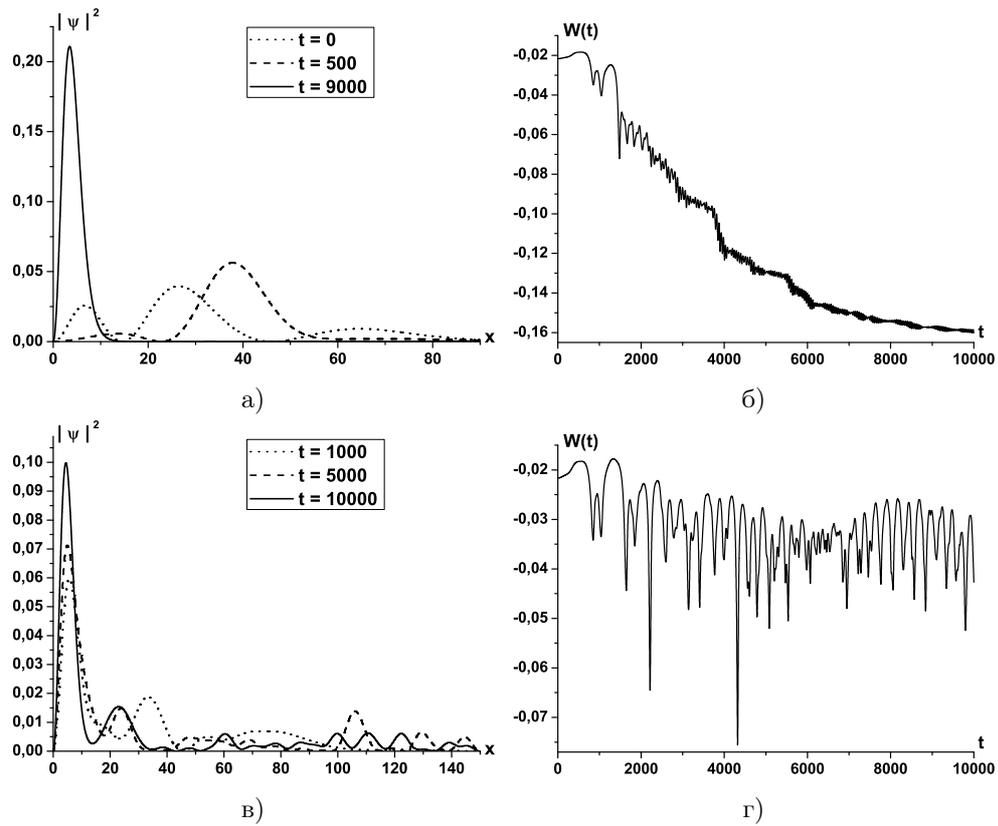


Рис. 6: Эволюция полярона из состояния (9) и соответствующая энергия электрона  $W(t)$  при коэффициентах трения  $\gamma = 4$  (а, б) и  $\gamma = 0$  (в, г).

3. Время эволюции полярона в основное состояние в присутствии трения зависит от типа комбинации начального состояния. Если для комбинации (7) это  $t \approx 3000$ , то для (8) и (9)  $t \approx 6000$  и  $t \approx 9000$  соответственно.

Авторы надеются использовать рассматриваемый подход для исследования широкого круга вопросов динамики электронных состояний в полярных средах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты № 07-07-00313, № 08-01-00800-а, № 06-01-00228, № 07-01-00738-а.

### 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. Лахно 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, стр. 1088-1098.
- [6] Lakhno V.D. Dynamical polaron theory of the hydrated electron. // Chemical Physics Letters, 2007, т. 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] Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989, стр. 296-299.