МУИС, Эрдэм Шинжилгээний бичиг, Физик № 355(16), 2011, хууд. 18-23

Потенциал орон дахь бөөмийн сарнилын загварчлал

О.Лхагва, Н.Цогбадрах, М.Батмөнх*

Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль, Онол Туршлагын Физикийн тэнхим

**E-mail:* batmunkhm@hotmail.com

Бид Шредингерийн шугаман бус тэгшитгэлийг төгсгөлөг ялгаврын аргаар шийдэж, зожиг долгио буюу Солитон(Soliton)-ы цомог, хөдлөгөөнийг дүрсэлж, мөргөлдөх, давхцах, саадаар нэвтрэх зэрэг физик үзэгдлийг нь судалсан[1]. Энэхүү ажилд хугацаанаас хамаарсан нэг хэмжээст Шредингерийн тэгшитгэлийг Кранк-Николсаны[2] төгсөглөг ялгаврт жороор шийдэх арга зүй боловсруулж, мөнхүү аргыг потенциал оронд бөөмийн сарнилын хувьсал зүйг загварчлахад хэрэглэв. Цаашид уг жорыг нанобүтэц дундуур бөөм нэвтрэх үзэгдлийн судалгаа бас сарнилын шугаман бус төрх зүйг судлахад хэрэглэх бодол өвөрлөж байна.

Түлхүүр үг: *Кранк-Николсаны арга, 3 диагоналт матриц, Гауссын багц долгио, потенциал саад,*

I. ОРШИЛ

Өнөө үед Бозе-Эйнштейний тунамал, шугаман бус оптикийн (лазер) хувирал үзэгдлийг судлахад Гауссын багц долгионы(бөөм) мөргөлдөөн, давхцал, мөн потенциал саад дахь бөөмийн харимхай резонанс, сарнил зэрэг асуудлын судалгаанд их анхаарал тавьж байна[3,4].

Байгаль, нийгмийн хувьслын язгуур чанар нь математик хэлээр бол *шугаман бус* зүй жамтай аж. Шугаман бус жам нь долгионы багцрал буюу долгионыг сүлэлдүүлж цогцос бүрэлдэхүйд хүргэдэг байна. Тухайлбал, дэлхийн цаадаанд цаг агаарын хувирал хуйлрал, плазмын үзэгдэл, хар салхи, луу унжих, одон орны мушгиралт хувьсал болоод хатуу, шингэн, хийн бие дотор явах аливаа хувирал шугаман бус төрхтэй. Түүнчлэн мэдээлэл дамжих, энерги зөөх хийгээд физик, хими, биологи, анатоми-хүний тархины нейроны хувьсан өөрчлөгдөхүйд зожиг маягийн багц долгио ямагт бүрэлдэх аж. Квант механикт бол бөөмс потенциал орны бүтэц дундуур туулахад мөн л шугаман бус долгио чухал үүрэгтэй.

Цаашид сонирхож буй физик судалгааны чиг бодлыг амдуулан математик арга зүй эмхлэн боловсруулсныг энэхүү ажилд толилуулж байна.

II. МАТЕМАТИК ТОМЪЁОЛОЛ.

Хугацаанаас хамаарсан нэг хэмжээст Шредингерийн тэгшитгэл:

$$i\hbar\cdot\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\cdot\psi(x,t) \qquad (1)$$

Энд $m=\frac{1}{2}$, $\hbar=1$. Гараанд бөөмийг σ_0 завсарт хориглосон дараах Гауссын багц долгио орлож байна:

$$\psi(x,0)=e^{ik_0x}\cdot e^{-(x-x_0)^2/2\sigma_0^2} \qquad (2)$$

Энд k_0,σ_0-багц долгионы хурд болон өргөн. x_0-багц долгионы төв.

Энэхүү тэгширтэлийн өндөр нарийвчлалтай бас тогтвортой шийдийг олох зорилт тавьж байна. (1) тэгшитгэлийг Кранк-Николсаны төгсөглөг ялгаварт хэлбэрт хувиргавал[2]

$$\psi(x_{n-1},t_{j+1})+\left[i\cdot\lambda-\varepsilon^2\cdot V(x_n)-2\right]\cdot\psi(x_n,t_{j+1})$$
$$+\psi(x_{n+1},t_{j+1})=\psi(x_{n-1},t_j)+$$
$$\left[i\cdot\lambda+\varepsilon^2\cdot V(x_n)+2\right]\cdot\psi(x_n,t_j)-\psi(x_{n+1},t_j) \qquad (3)$$

Энд $\lambda=\frac{2\cdot\varepsilon^2}{\delta}$, $\varepsilon=\frac{L}{N}$, $\delta=2\cdot\varepsilon^2$, $n=0,1..N-1$, $j=0,1..J-1$, L- урт.

(3) тэгшитгэлийн баруун гар тал нь бүхэлдээ $j=0$ үе дэх захын нөхцлөөр өгөгдсөн гишүүн байна. Иймд хугацааны j үе бүрт $\psi_n^{(j)}(n=0,1,...,N-1)$ үл мэдэгдэгчид нь

зөвхөн x тэнхэлгийн дагуу зангилааны дугаараас хамаарах, харин $j+1$ үед (3) бол $N-1$ тооны $\psi_n^{(j+1)}$ үл мэдэгдэгч бүхий алгебрын гурван диагоналт систем тэгшитгэл юм[2].

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & a_{N-2} & b_{N-2} & c_{N-1} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & a_{N-1} & b_{N-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_1^{j+1} \\ \psi_2^{j+1} \\ \psi_3^{j+1} \\ \vdots \\ \psi_{N-2}^{j+1} \\ \psi_{N-1}^{j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1^{\ j} \\ d_2^{\ j} \\ d_3^{\ j} \\ \vdots \\ d_{N-2}^{\ \ j} \\ d_{N-1}^{\ \ j} \end{pmatrix} \tag{4}$$

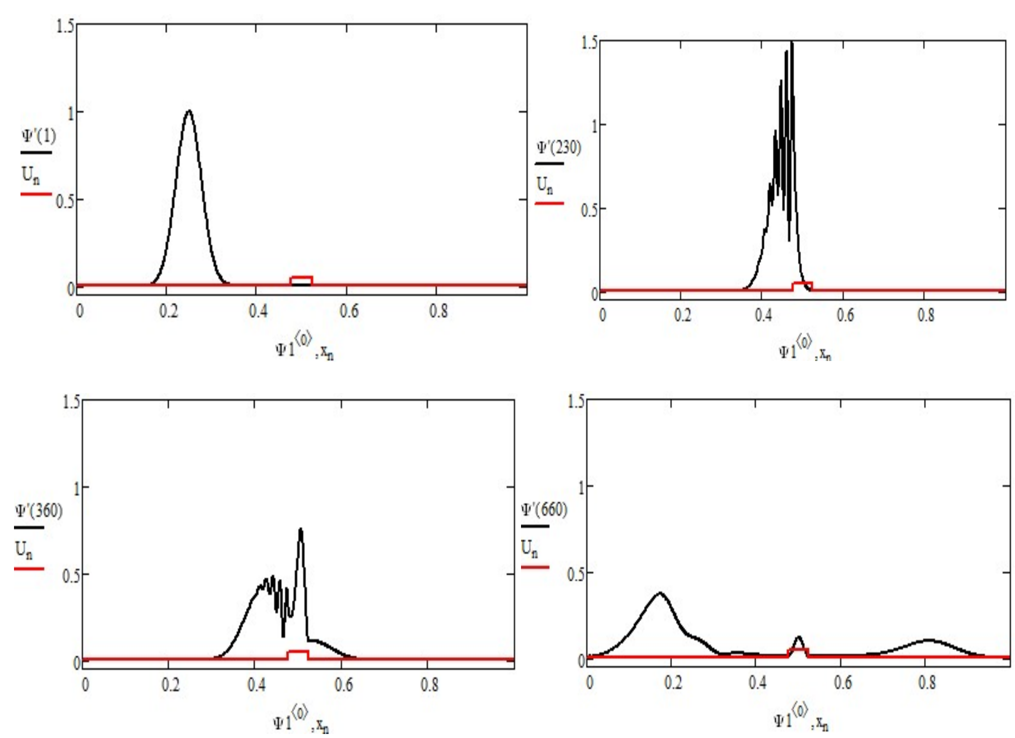
Энд $a_n = 1$, $b_n = 2\lambda - \varepsilon^2 V_n - 2$, $c_n = 1$,
$d_n^{\ j} = \left(2\lambda + \varepsilon^2 \cdot V_n + 2\right) \cdot \psi_n^j - \left(\psi_{n-1}^j + \psi_{n+1}^j\right)$.

(4) тэгшитгэлийн баруун дахь $d_n^{\ (0)}$ утгыг $\psi_n^{(0)}$ анхны нөхцөөр илэрхийлж, тэгшитгэлийн зүүн талын $\psi_n^{(1)}$ функцийн утгыг олно. Эл $\psi_n^{(1)}$ функцийн утгаар хугацааны $d_i^{\ (1)}$ утгыг шинээр олоод тэгшитгэлийг $j = 2$ үед бодно[2]. Хугацааны үеэр авах давшилт ихсэхэд функцийн ялгаа нэн бага болох буюу $j >> 1$ буюу $\left|\psi^{(j+1)} - \psi^{(j)}\right| \to 0$ байх нөхцлөөс тогтвортой шийд олдоно. (4) тэгшитгэлийг Гауссын зайлуулалтын дээд хоёр диагоналт системд хувирган шийдэх аргыг хавсралтад оруулав.

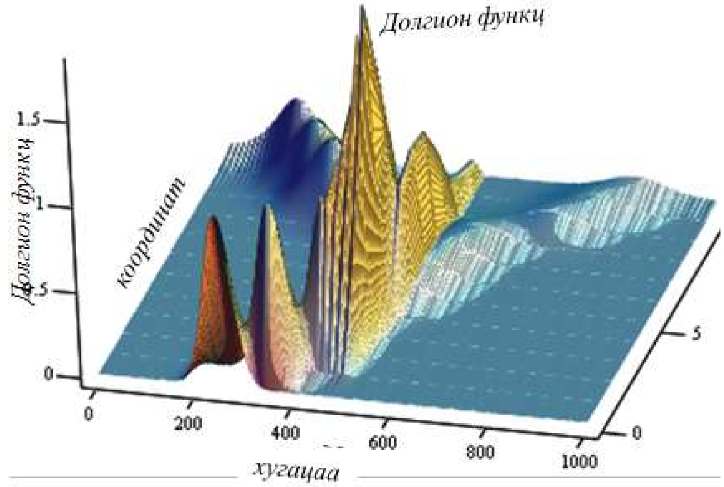
III. ТООЦОО, ҮР ДҮН.

Хугацаанаас хамаарсан нэг хэмжээст Шредингерийн (1) тэгшитгэлд тэгш өнцөгт төрхтэй потенциал орон сонгож, багц долгионы сарнилыг тооцоолсон дүнгээс дараах зурагт үзүүлэв.

1. Тэгш өнцөгт потенциал саад.

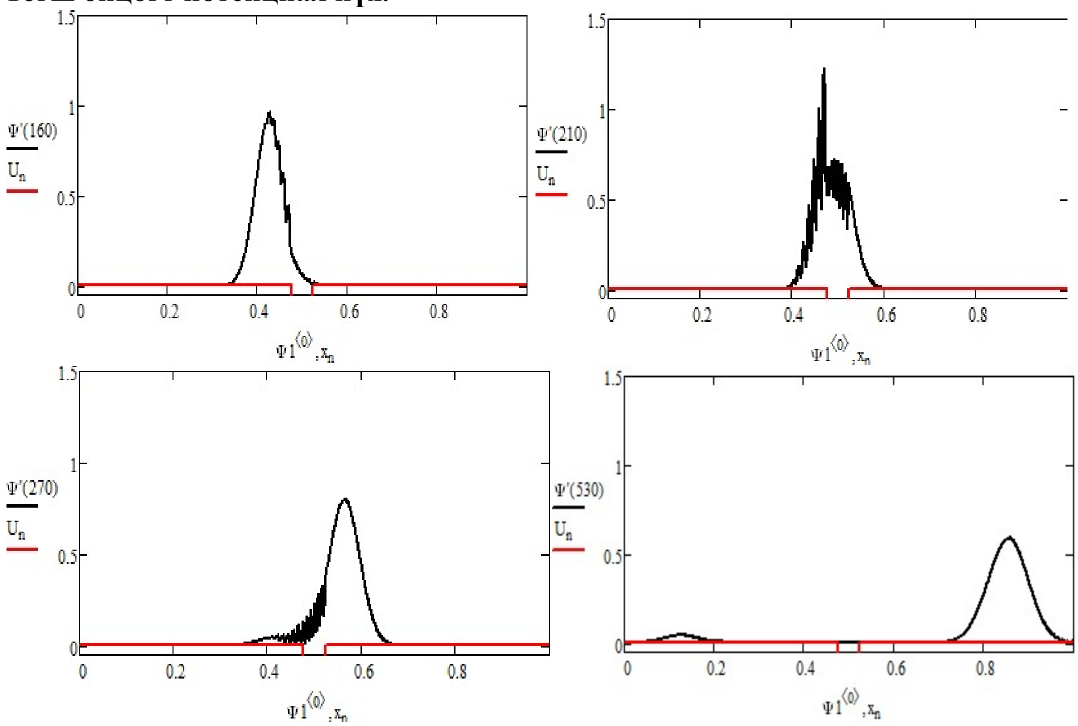


Зураг 1: Хугацааны 1, 230, 360, 660 утгуудад харгалзах багц долгионы сарнил. Эхэн үед багц долгио орон руу явж байна. Потенциал саад руу ормогц багц долгионы голч далайц эрс өөрчлөгдөж байна. Саад дотор тохиосон үйлийн үрийн дүнд бөөмийн гол эрч буцаж сарниж байхад яльгүй нь нэвтэрч байна.

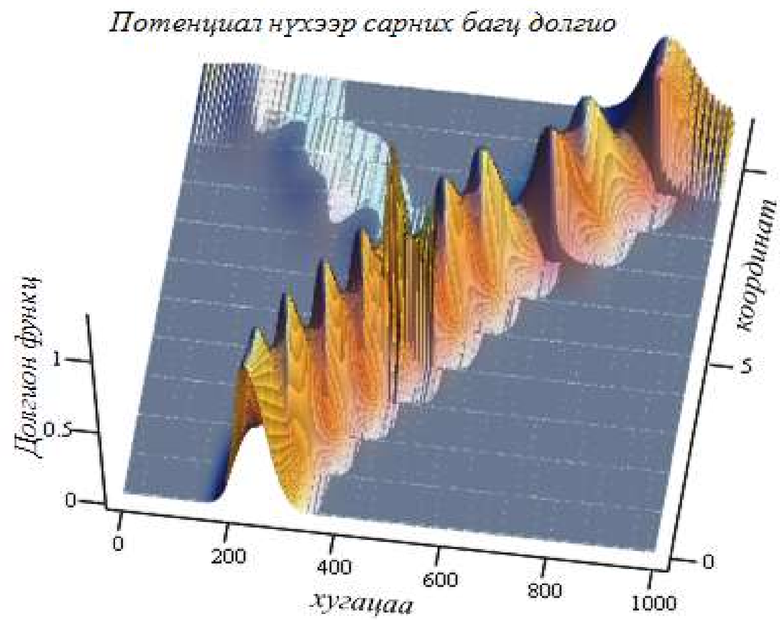


Зураг 2: Багц долгионы потенциал саад дээрх сарнилын төрх хувирлыг хугацаа, координатын хавтгайд дүрслэн харуулжээ. Анх туссан багц саадын оронд эрс хувирал туулж байна. Цагийн урсгалаар долгио нэвтэрсэн болон сарнисан хоёр долгионд салж хоёрт тийш салан одож байгаа нь харагдаж буайна

2. Тэгш өнцөгт потенциал нүх.

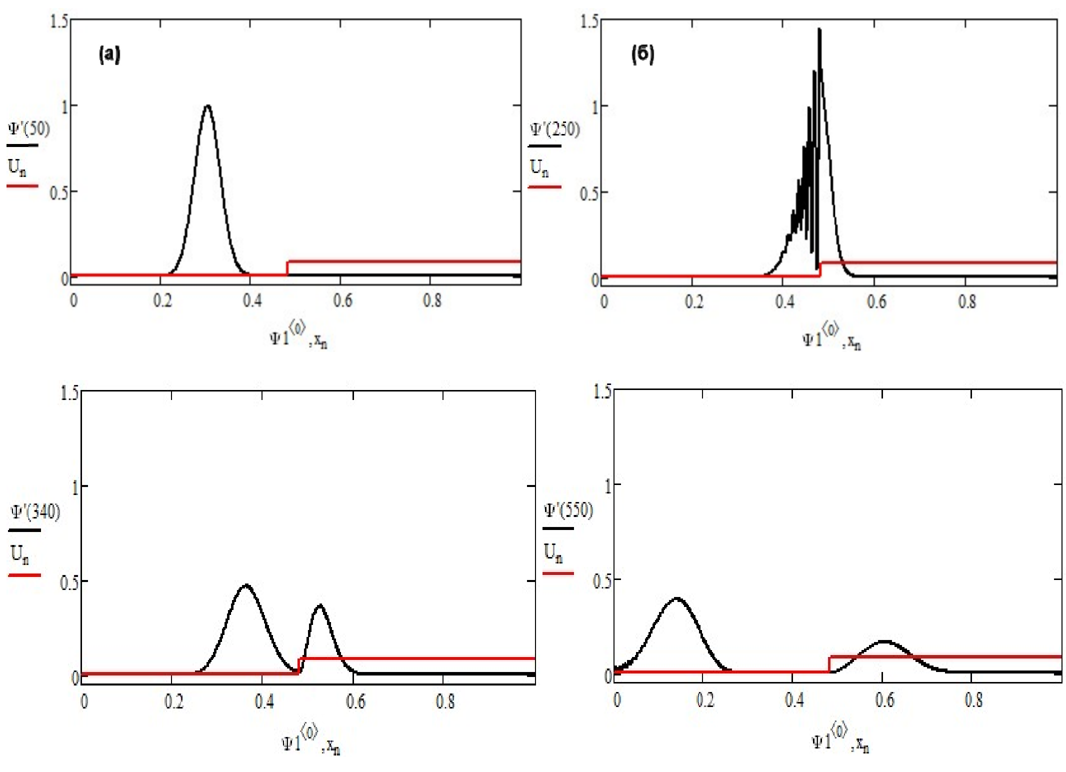


Зураг 3: Гараанаас тоолоход хугацааны 160, 210, 270, 530 дахь эгшинд багц долгио потенциал нүхэнд ямар үйлийн үр туулж байгаааг дүрслэн үзүүлжээ. Потенциал нүхээр нэвтэрсэн долгионы зонхилох эрч нь нэвтэрч, яльгүй нь буцаж сарнисан байна.

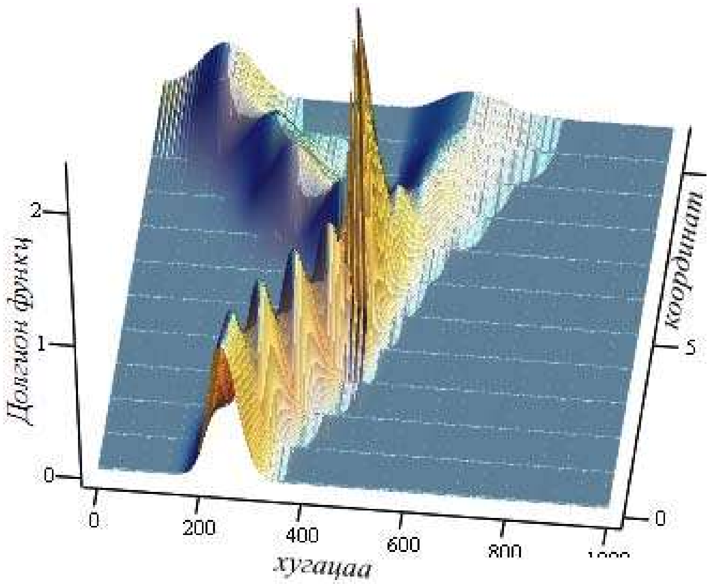


Зураг 4: Багц долгионы потенциал нүх дээрх сарнилын үйл өрнөлийг хугацаа, координатын хавтгайд дүрслэн харуулжээ. Анх туссан багц саадын оронд эрс хувиралд орж байна. Долгио ихээхэн эрчтэй нэвтэрч, буцаж сулаватар сарнисан нь харагдаж байна.

3. Төгсгөлгүй өндөр потенциал хясаа



Зураг 5: Төгсгөлгүй өндөр потенциал хясаа руу туссан багцын хувирал төрх. а). Хясаа руу дөхөж явна. б). Хясааг мөргөснөөс төрх эрс хувирч ойлт үүсч байа. в). Долгионы зонхилох эрчим хэдий нь ойгоод буцаж байна. в). Шургасан долгио яваандаа унтарч байна.



Зураг 4: Багц долгио төгсгөлгүй өндөр потенциал хясааг мөргөх үйл өрнөлийг хугацаа, координатын хавтгайд дүрслэн харуулжээ. Долгио эрчтэй ойж, потенциал хясаа руу шургасан нь унтарч байна.

IV. ДҮГНЭЛТ

Долгион багцын потенцал оронд сарних зүй тогтлыг Шредингерийн хугацаанаас хамаарсан тэгшитгэлийг шийдэж илэрхийлэх арга боловсруулж тооцоо үйлдэн, хөдөлгөөнт буюу урсгалт загвар бүтээв. Хугацаанаас хамаарсан тухайн уламжлалт тэгшитгэлийг шийдэхдээ эдүгэгийн нэн өндөр нарийвчлал бүхий Кранк- Никольсоны аргыг хэрэглэв. Боловсруулсан аргыг цаашид нано бөөм бүтэц дундуур цэнэг нэвтрэх үзэдлийг судлахад хэрэглэхийг зорьж байна.

MathCAD багцыг ашиглан тооцоо үйлдэв**.** Судалгааны тооцоог урьдын нэгэн адил инновацийн Н.1.7.2 “Нүүрстөрөгчийн нанохоолой гарган авах, түүнийг түлшний элементэд хэрэглэх боломж” сэдэвт төслийн санхүүжилтээр авсан компьютерээр гүйцэтгсэн тул талархлаа илэрхийлж байна.

V. ИШЛЭЛ

[1] М.Батмөнх, “Солитоны мөргөлдөөний судалгаа”, удирдагч: О.Лхагва, Оюутаны ЭШ бүтээлийн эмхтгэл: 2008, МУИС -XI (10), P. 16.

[2] О.Лхагва, М.Батмөнх “ТООЦОН БОДОХ МАТЕМАТИК” сурах бичиг 2010.

[3] Travis Norsen, Joshua Lande, S. B. McKagan, arXiv:0808.3566v2 [quant-ph] 18 Apr 2009

[4] Giuseppe Molesini and Maurizio Vannoni, Eur. J. Phys. 29 (2008) 403–411

VI. ХАВСРАЛТ

Гурван диогналт тэгшитгэлийг ойролцоолон шийдэхүй. Кранк-Николсоны аргад бүрэлдсэн (4) гурван диагоналт систем алгебрын тэгшитгэлийг хэрхэн шийдэх тухай үзье. Матрицыг дээд $(\hat{U})$, доод $(\hat{L})$ гурвалжин матрицад задлах замаар алгебрын систем тэгшитгэлийг тооцооны цаг хөнгөвчлөхийн хамт найдвартай шийдвэрлэдэг аргыг гурван диогнолт систем тэгшитгэлийг шийдэхэд ч үр дүнтэй хэрэглэдэг[2]. Гауссын зайлуулах аргаар гурван диагоналт системийг хоёр диагоналт системд хувиргах жорыг хэрэглэе[2].

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0. & .... & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & . & .... \\ 0 & & & & \\ . & . & . & . & . \quad 0 \\ . & . & & a_{n-2}. & b_{n-2}...c_{n-2} \\ 0 & .... & 0 & a_{n-1} & ....b_{n-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ . \\ . \\ U_{n-2} \\ U_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_{2,} \\ . \\ . \\ d_{n-2} \\ d_{n-1} \end{pmatrix} \quad (А)$$

Энд: $b_i = (1+\lambda)$, $a_i = -\dfrac{\lambda}{2}$, $c_i = -\dfrac{\lambda}{2}$,

$d_1 = \dfrac{\lambda}{2}\left(U_{0,0} + U_{2,0}\right) + (1-\lambda)\cdot U_{1,0}$,

$d_i = \dfrac{\lambda}{2}\left(U_{i-1,0} + U_{i+1,0}\right) + (1-\lambda)\cdot U_{i,0}$,

$i = 2,3,..., n-2$

Хувьсагчийг зайлуулах арга хэрэглэж гурван диагоналт (А) тэгшитгэлийг

$$\begin{pmatrix} 1 & c_1^{*} & 0. & ....0 \\ 0...1 & c_2^{*} & . & .... \\ 0 & & & \\ . & . & . & . \quad 0 \\ . & . & & . \; 1....c_{n-2}^{*} \\ 0 & .... & 0 & .....1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ . \\ . \\ U_{n-2} \\ U_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1^{*} \\ d_{2,}^{*} \\ . \\ . \\ d_{n-2}^{*} \\ d_{n-1}^{*} \end{pmatrix} \quad (Б)$$

хэлбэрт шилжүүлж болно. Сүүлийн тэгшитгэлийг Гауссын зайлуулалтын дээд хоёр диагоналт системд хувиргасан тэгшитгэл бүрийг диагоналын шинээр үүссэн $b_i^{`}$ элементэд хувааж "нормчилсон" байна. Шинэ болон хуучийн элементүүдийн хоорондох хамаарал:

$c_1^* = \dfrac{c_1}{b_1}$, $\quad c_i^* = \dfrac{c_i}{b_i - a_i \cdot c_{i-1}^*}$,

$i = 2,3,........, (n-2)$ $\; d_1^* = \dfrac{d_1}{b_1}$,

$$d_i = \frac{d_i - a_i d_{i-1}^*}{b_i - a_i \cdot c_{i-1}^*}, \; i = 2,3,........(n-2) \qquad (В)$$

Эл (В) илэрхийллийн дагуу c_i^*, d_i^* коэфицентүүдийг доороос дээш өгсүүлэн тооцон олох юм. Эдгээрийг ашиглан (8.36) системийн шийдийг хамгийн их $n-1$ дугаартай тэгшитгэлээс эхлэн ухруулан тооцоолно. Үүнд:

$U_{n-1} = d_{n-1}^*$ дараачийн $U_{n-2} + C_{n-2}^* U_{n-1} = d_{n-2}^*$ тэгшитгэлээс өмнөх U_{n-1} коэфицентийг хэрэглэвэл : $U_{n-2} = d_{n-2}^* - C_{n-2}^* U_{n-1}$

Энэ мэтчлэн цувруулан олох жорыг нэгтгэн бичвэл :

$$U_i = d_i^* - C_i^* U_{i+1}, \quad i = n-2, n-3, ...,2,1 \qquad (Г)$$

Тийнхүү U функцийн U_i утгыг зангилааны бүх цэгт тооцоолно. Гауссын зайлуулах арга нарийвчлалын хувьд их өндөр биш боловч нэн хялбар бөгөөд найдвартай арга болой.

Харин $j=1$ үе дэх $U_i^{(1)}$ функцийн эл утгыг (А) ашиглан тэгшитгэл дэх d_i утгыг шинээр олоод тэгшитгэлийг $j=2$ үед бодно. Хугацааны үеэр авах давшилт ихсэхэд функцийн ялгаа нэн бага болох буюу $j >> 1$ буюу $\left|U^{(j+1)} - U^{(j)}\right| \to 0$ байх нөхцлөөс тогтвортой шийд олдоно.