

Символьно-численные алгоритмы решения краевых задач в квантовой механике методом Канторовича

В.П. Гердт, В.А. Ростовцев, О. Чулуунбаатар
Лаборатория информационных технологий, ОИЯИ

С.И. Веницкий

Лаборатория теоретической физики, ОИЯИ

А.А. Гусев

Научный центр прикладных исследований, ОИЯИ

М.С. Касчиев

Институт математики и информатики, БАН, София, Болгария

Abstract

A program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach was created [4]. For this program benchmark Kantorovich calculations for three particles on a line were performed [5]. A symbolic-numerical algorithm for the computation of matrix elements in the parametric eigenvalue problem was elaborated [2]. On a base of this algorithm a program for computing potential curves and matrix elements of the coupled adiabatic radial equations for a hydrogen-like atom in a homogeneous magnetic field were created [3]. Applying the above programs calculation of a hydrogen atom photoionization in a strong magnetic field by using the angular oblate spheroidal functions were occurred [6].

В ряде случаев конечномерные квантовомеханические задачи приводятся к решению стационарного уравнения Шрёдингера для волновой функции $\Psi(\rho, \Omega)$, где \mathbf{H} – гамильтониан в d -мерном пространстве ($d > 1$) с эффективным потенциалом $\mathbf{U}(\rho, \Omega)$:

$$(\mathbf{H} + \mathbf{U}(\rho, \Omega))\Psi(\rho, \Omega) = E\Psi(\rho, \Omega). \quad (1)$$

Здесь E – спектральный параметр(энергия) системы, $\rho = \sqrt{r_1^2 + \dots + r_d^2}$ – гиперрадиус системы $\rho \in \mathbf{R}_+^1$, Ω – некоторый набор угловых координат, которые описывают движение системы на сфере $S^{d-1}(\Omega)$.

В методе Канторовича парциальная волновая функция $\Psi_i(\rho, \Omega)$ ищется в виде разложения по однопараметрическому набору поверхностных функций $\{B_j(\Omega; \rho)\}_{j=1}^N$:

$$\Psi_i(\rho, \Omega) = \sum_{j=1}^N B_j(\Omega; \rho)\chi_j^{(i)}(\rho). \quad (2)$$

В разложении (2) вектор-функции $\chi^{(i)}(\rho) = (\chi_1^{(i)}(\rho), \dots, \chi_N^{(i)}(\rho))^T$ являются неизвестными, а поверхностные функции $\mathbf{B}(\Omega; \rho) = (B_1(\Omega; \rho), \dots, B_N(\Omega; \rho))^T$ образуют ортонормированный базис $\{B_j(\Omega; \rho)\} \in L_2(S^{d-1})$ по набору угловых переменных Ω для каждого значения гиперрадиуса ρ , который рассматривается здесь как параметр. Базисные функции $B_j(\Omega; \rho)$ определяются как решения параметрической задачи на собственные значения

$$\left(-\frac{1}{\rho^2}\hat{\Lambda}_\Omega^2 + 2\mathbf{U}(\rho, \Omega)\right)B_j(\Omega; \rho) = \varepsilon_j(\rho)B_j(\Omega; \rho), \quad (3)$$

где $\hat{\mathbf{L}}_\Omega^2$ – самосопряженный оператор обобщенного углового момента. Собственные функции этой задачи удовлетворяют тем же краевым условиям по угловым переменным Ω , которые наложены на волновую функцию $\Psi_i(\rho, \Omega)$, но при каждом фиксированном значении параметра $\rho \in \mathbf{R}_+^1$

$$\left\langle B_i(\Omega; \rho) \left| B_j(\Omega; \rho) \right\rangle_\Omega = \int \bar{B}_i(\Omega; \rho) B_j(\Omega; \rho) d\Omega = \delta_{ij}, \quad (4)$$

где δ_{ij} – символ Кронекера, а черта обозначает комплексное сопряжение.

После вариации подходящего функционала (Рэля-Ритца или Хюльгена) с использованием разложения (2) уравнение (1) сводится к системе из N обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка относительно неизвестных функций $\chi(\rho) \equiv \chi^{(i)}(\rho)$:

$$\left(-\frac{1}{\rho^{d-1}} \mathbf{I} \frac{d}{d\rho} \rho^{d-1} \frac{d}{d\rho} + \mathbf{V}(\rho) + \mathbf{Q}(\rho) \frac{d}{d\rho} + \frac{1}{\rho^{d-1}} \frac{d\rho^{d-1} \mathbf{Q}(\rho)}{d\rho} - 2E \mathbf{I} \right) \chi(\rho) = 0. \quad (5)$$

Здесь \mathbf{I} , $\mathbf{V}(\rho)$ и $\mathbf{Q}(\rho)$ матрицы размерностью $N \times N$, элементы которых определяются соотношениями

$$\begin{aligned} V_{ij}(\rho) &= H_{ij}(\rho) + \frac{\varepsilon_i(\rho) + \varepsilon_j(\rho)}{2} \delta_{ij}, & H_{ij}(\rho) &= H_{ji}(\rho) = \left\langle \frac{\partial B_i(\Omega; \rho)}{\partial \rho} \left| \frac{\partial B_j(\Omega; \rho)}{\partial \rho} \right\rangle_\Omega, \\ I_{ij} &= \delta_{ij}, & Q_{ij}(\rho) &= -Q_{ji}(\rho) = - \left\langle B_i(\Omega; \rho) \left| \frac{\partial B_j(\Omega; \rho)}{\partial \rho} \right\rangle_\Omega. \end{aligned}$$

Применяются обобщенные однородные краевые условия для парциальной функции $\Psi_i(\rho, \Omega)$ по гиперрадиусу ρ в граничных точках конечного интервала $0 \leq \rho_{\min} < \rho < \rho_{\max} < \infty$:

$$\begin{aligned} \mu_1 \frac{\partial \Psi_i(\rho, \Omega)}{\partial \rho} - \lambda_1 \Psi_i(\rho, \Omega) &= 0, & \rho &= \rho_{\min}, & \Omega &\in S^{d-1}(\Omega), \\ \mu_2 \frac{\partial \Psi_i(\rho, \Omega)}{\partial \rho} - \lambda_2 \Psi_i(\rho, \Omega) &= 0, & \rho &= \rho_{\max}, & \Omega &\in S^{d-1}(\Omega), \end{aligned}$$

где $\mu_1 \equiv \mu_1(\rho_{\min})$, $\lambda_1 \equiv \lambda_1(\rho_{\min})$, $\mu_2 \equiv \mu_2(\rho_{\max})$, $\lambda_2 \equiv \lambda_2(\rho_{\max})$ – вещественные числа, зависящие от ρ_{\min} , ρ_{\max} и определяемые из асимптотических разложений решения. Поскольку поверхностные функции образуют базис, то выполняется условие

$$\left\langle B_j(\Omega; \rho) \left| \mu_l \frac{\partial \Psi_i(\rho, \Omega)}{\partial \rho} - \lambda_l \Psi_i(\rho, \Omega) \right\rangle_\Omega = 0, \quad l = 1, 2,$$

из которого следуют матричные однородные краевые условия

$$\mu_l \left(\mathbf{I} \frac{d}{d\rho} - \mathbf{Q}(\rho) \right) \chi(\rho) - \lambda_l \chi(\rho) = 0, \quad l = 1, 2.$$

Детальный вид краевых условий в зависимости от поведения потенциала в окрестности $\rho \rightarrow 0$ и $\rho \rightarrow \infty$ и соответствующих асимптотик решения представлен в работах [2, 3, 4].

Для редукции исходной двумерной задачи к системы радиальных уравнений решаемой на конечном интервале $\rho \in (\rho_{\min}, \rho_{\max})$, с краевыми условиями третьего типа,

разработан набор символьно-численных алгоритмов решения параметрической задачи на собственные значения и вычисления эффективных потенциалов, включая построение асимптотик эффективных потенциалов и решений радиальных уравнений при малых и больших значениях параметра ρ .

В качестве тестовых примеров рассматриваются имеющая аналитическое решение задача о трёх тождественных частицах на прямой с парными потенциалами нулевого радиуса и задача об водородоподобном атоме в однородном магнитном поле.

Пример 1. Три тождественные частицы на прямой с парными потенциалами нулевого радиуса [5].

Уравнение Шредингера для волновой функции в гиперсферических координатах ρ и θ , ($\eta = \rho \cos \theta$, $\xi = \rho \sin \theta$, $-\pi \leq \theta \leq \pi$, где $\{\xi, \eta\} \in \mathbf{R}^2$ – локальные координаты Якоби) в системе центра масс имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \Psi(\rho, \theta) + V(\rho, \theta) \Psi(\rho, \theta) = E \Psi(\rho, \theta). \quad (6)$$

Здесь E – энергия в системе центра масс, а m – эффективная масса, которая для тождественных частиц совпадает с массой m каждой из частиц. Потенциал $V(\rho, \theta)$ задан в виде суммы парных потенциалов

$$V(\rho, \theta) = V(\sqrt{2}\rho |\cos \theta|) + V(\sqrt{2}\rho |\cos(\theta - 2\pi/3)|) + V(\sqrt{2}\rho |\cos(\theta + 2\pi/3)|),$$

где $V(x_{ij}) = c\delta(x_{ij})$ – потенциал взаимодействия i -той и j -той частиц, x_{ij} – расстояние между ними. Вычисленные с помощью программы KANTBP волновые функции дискретного и непрерывного спектра представлены на Рис. 1, 2.

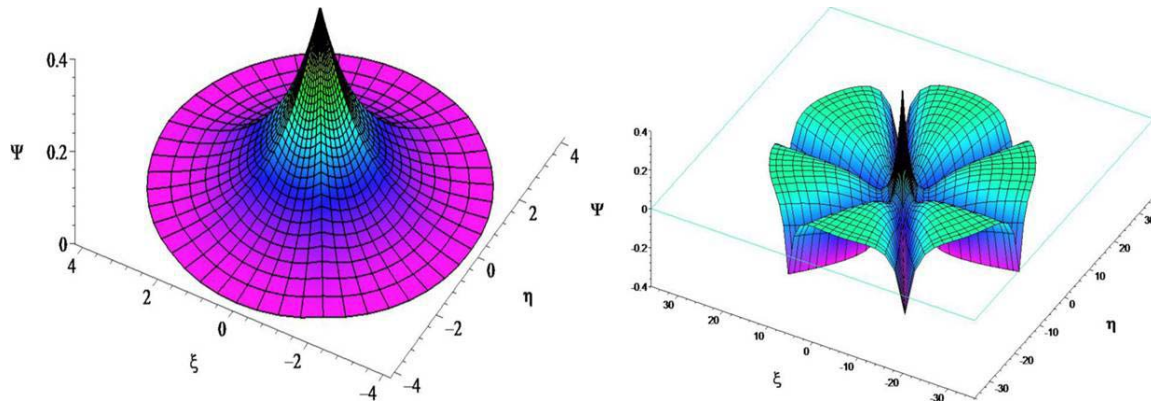


Рис. 1: Волновые функции дискретного спектра задачи трёх частиц на прямой с парными потенциалами нулевого радиуса ($c = -1$). Слева $E = -\pi^2/36$, справа $E = 0$

Пример 2. Водородоподобный атом в однородном магнитном поле [6].

Уравнение Шредингера для волновой функции водородоподобного атома с зарядом ядра Z , находящимся в аксиально симметричном магнитном поле $\vec{B} = (0, 0, B)$, записанное в сферических координатах (r, θ, φ) при фиксированном значении магнитного квантового числа $m = 0, \pm 1, \dots$ и z-четности $\sigma = \pm 1$ сводится к эллиптическому

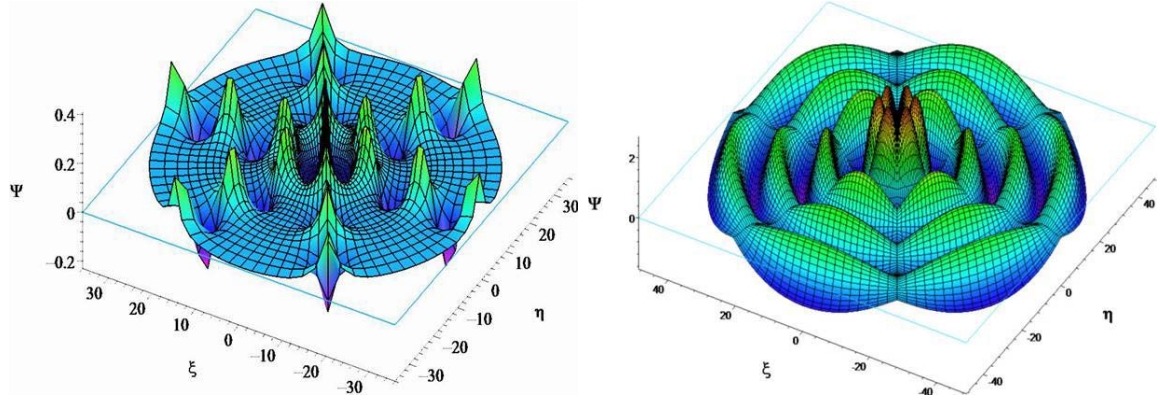


Рис. 2: Волновые функции непрерывного спектра задачи трёх частиц на прямой с парными потенциалами нулевого радиуса в случае притяжения, $c = -1$, $k = \pi/6$ (слева) и отталкивания, $c = +1$, $k = \pi/6$ (справа)

уравнению второго порядка в частных производных в области $\Omega = \{0 < r < \infty, -1 < \eta = \cos \theta < 1\}$:

$$\left(-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{\hat{A}^{(0)}}{r^2} - \frac{2Z}{r} - \epsilon\right) \Psi(r, \eta) = 0. \quad (7)$$

Здесь $\epsilon = 2E$ удвоенная энергия (в Ридбергах $1\text{Ry} = (1/2)$ а.е.) состояния $|m\sigma\rangle$ при фиксированных значениях m и σ , $\hat{A}^{(0)} = A^{(0)} + \gamma mr^2$, оператор $A^{(0)} \equiv A^{(0)}(p)$ – соответствует оператору квазиуглового уравнения для сплюснутых сфероидальных функций,

$$A^{(0)}(r, \eta) = -\frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{m^2}{1 - \eta^2} + p^2 (1 - \eta^2), \quad (8)$$

где слагаемое с параметром $p = \gamma r^2/2$ соответствует потенциальной энергии взаимодействия электрона с магнитным полем в приближении бесконечной массы ядра в атомной системе единиц ($\hbar = m_e = e = 1$), $m = 0, \pm 1, \dots$ магнитное квантовое число. Здесь $\gamma = B/B_0$, $B_0 \cong 2.35 \times 10^9 G$ безразмерный параметр, характеризующий магнитное поле B .

Вычисленные с помощью программы ROTNMF и KANTBP волновые функции непрерывного спектра а также зависимости сечений фотоионизации из основного и возбуждённого состояния от энергии состояния непрерывного спектра представлены на Рис. 3, 4.

Развитый набор символьно-численных алгоритмов обеспечивает удобный инструментарий не только для описания процессов образования и ионизации водородоподобных атомов в магнитных ловушках и вычисления волновых функций водородоподобного атома, или квантовой точки в сильном магнитном поле, но и анализа точности и скорости сходимости используемых разложений искомого решения. Например, используя алгоритм MATRM для вычисления с заданной точностью производных по параметру от матричных элементов высокого порядка [2], можно строить эффективные операторные аппроксимации для системы радиальных уравнений [6],

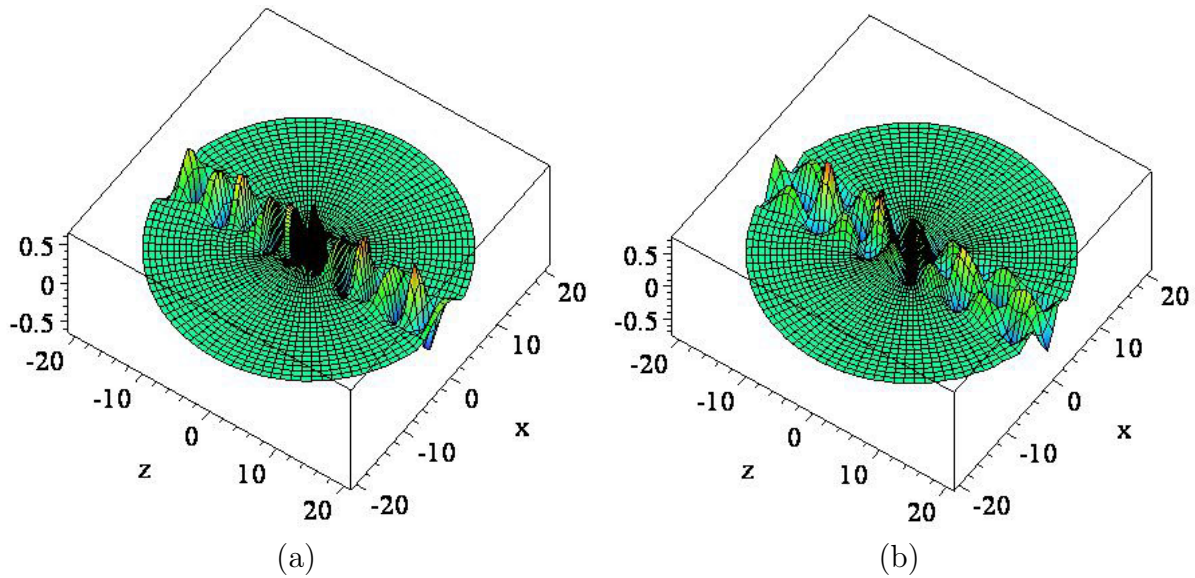


Рис. 3: Волновые функции Ψ_1 и Ψ_2 состояний непрерывного спектра атома водорода в магнитном поле $B = \gamma B_0$ соответствующие первому (а) и второму (б) открытым каналам при $\sigma = -1$, $Z = 1$, $\gamma = 1$ и $m = 0$ с энергией $E = 1.7$ а.е. выше второго порога $1/2\epsilon_{m2}^{th} = 1.5$

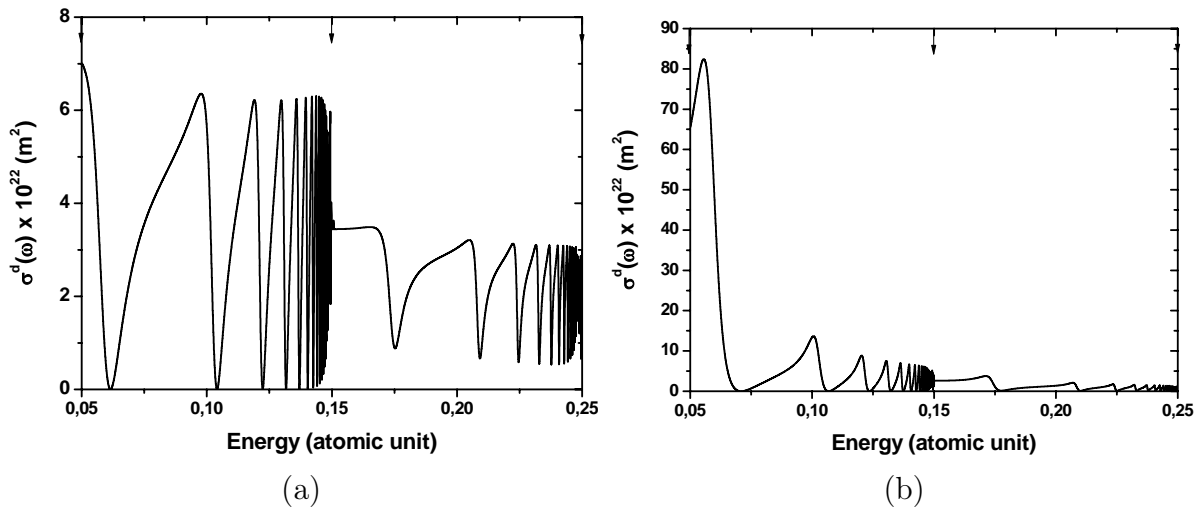


Рис. 4: Сечения фотоионизации из состояний $1s$ (слева) и $3d$ (справа) атома водорода в магнитном поле $B = \gamma B_0$ в зависимости от энергии конечного состояния E (при $\sigma = -1$, $m = 0$) для $B_0 = 2.35 \times 10^4 T$ ($\gamma = 1 \times 10^{-1}$). Стрелками указаны энергии первых двух порогов Ландау $1/2\epsilon_{mj}^{th}$

позволяющие исследовать сходимость правил сумм по спектру параметрической задачи и получать верхние и нижние оценки искомого решения [5]. В сочетании с алгоритмом унитарной декомпозиции оператора эволюции [7, 8] данный подход имеет перспективы для компьютерного моделирования динамики зеемановских состояний в переменных электрических полях, а также поведения ионов в ловушечных моделях элементов квантовых компьютеров.

Список литературы

- [1] Л.В. Канторович и В.И. Крылов, Приближенные методы высшего анализа. Москва, Гостехиздат, 1952.
- [2] С.И. Веницкий, В.П. Гердт, А.А. Гусев, М.С. Касчиев, В.А. Ростовцев, В.Н. Самойлов, Т.В. Тюпикова, О. Чулуунбаатар. Символьно-численный алгоритм вычисления матричных элементов параметрической задачи на собственные значения // Программирование **33**, 63–76 (2007).
- [3] O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, V.P. Gerdt, V.A. Rostovtsev S.I. Vinitisky, A.G. Abrashkevich, M.S. Kaschiev, Computer Physics Communication, (2007) (submitted).
- [4] O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, A.G. Abrashkevich, A. Amaya-Tapia, M.S. Kaschiev, S.Y. Larsen, S.I. Vinitisky. KANTBP: A program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach. // Computer Physics Communication, **177**, 649–675 (2007).
- [5] O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, M.S. Kaschiev, V.A. Kaschieva, A. Amaya-Tapia, S.Y. Larsen, S.I. Vinitisky, J. Phys. **B 39**, 243–269 (2006).
- [6] O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, V.L. Derbov, M.S. Kaschiev, V.V. Serov, L.A. Melnikov, S.I. Vinitisky, J. Phys. **A 40**, 11485–11524 (2007).
- [7] С.И. Веницкий, В.П. Гердт, А.А. Гусев, М.С. Касчиев, В.А. Ростовцев, В.Н. Самойлов, Т.В. Тюпикова, И. Увано. Символьный алгоритм факторизации оператора эволюции нестационарного уравнения Шредингера. Программирование, **32**, 58–70 (2006).
- [8] V.V. Serov, V.L. Derbov, B.B. Joulakian, S.I. Vinitisky. Wave-packet-evolution approach for single and double ionization of two-electron systems by fast electrons, Phys. Rev. A **75**, 012715 (2007).