

ПОИСК СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ ОДНОМЕРНОЙ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ СТЕПЕННЫМ МЕТОДОМ: ПРАКТИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

Н. Р. Врублевская^{a,b}, *Д. Е. Шипило*^{a,b,*}, *П. Я. Илюшин*^{a,b}, *И. А. Николаева*^{a,b},
О. Г. Косарева^{a,b}, *Н. А. Панов*^{a,b}

^a *Физический факультет, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия*

^b *Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 7 июня 2024 г.,
после переработки 7 июня 2024 г.
Принята к публикации 12 июня 2024 г.

Для численного решения нестационарного уравнения Шредингера в задачах об эволюции электрона в заданном потенциале под действием поля ультракороткого импульса высокой интенсивности необходимо с высокой точностью находить связанные состояния этого потенциала. В работе рассматривается применение степенного алгоритма с использованием операторных полиномов Чебышева для поиска связанных состояний одномерного квазикулоновского потенциала. Сходимость алгоритма улучшается с увеличением степени полинома m , насыщаясь при $m \geq 8$. Для такой степени основное состояние находится за $\sim 10^3$ операций вычисления гамильтониана, высоколежащие — за $\sim 10^5$ операций (несколько секунд и несколько минут соответственно).

DOI: 10.31857/S004445102411004X

Одномерные квантовые системы, в которых гамильтониан \hat{H} зависит от единственной координаты x , исследуются с самого зарождения квантовой механики в связи с возможностью туннелирования частиц через потенциальный барьер [1]. В 1980–90-х годах, когда вычислительные возможности были невелики по сравнению с современными, зависимость гамильтониана от единственной пространственной координаты позволила провести численное моделирование нелинейной ионизации в таких системах [2–4]. В последнее десятилетие относительно небольшая вычислительная сложность численного интегрирования одномерного нестационарного уравнения Шредингера дала возможность самосогласованно использовать результаты квантовых расчетов в качестве нелинейного источника в $(3D + t)$ -уравнениях распространения [5] и моделировать с его помощью эффекты квантовой электродинамики в сильных полях ультракоротких импульсов [6].

Взаимодействие одномерной квантовомеханической системы с электромагнитным полем описывается нестационарным уравнением Шредингера для волновой функции $\Psi(x, t)$, здесь и далее используется атомная система единиц, если не указано обратного:

$$i \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(x, t) + \hat{\mathcal{H}} \Psi(x, t), \quad (1)$$

где

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{U}(x)$$

является гамильтонианом электрона в независимом от времени t потенциале $\hat{U}(x)$, $\hat{\mathcal{H}}(t)$ — оператор, описывающий взаимодействие электрона с полем электромагнитной волны. Уравнение (1) должно быть дополнено начальным условием $\Psi(x, t = -\infty)$. Система при $t = -\infty$ обычно находится в связанном состоянии, поэтому начальными условиями для уравнения (1) являются волновые функции стационарных состояний $|\Psi_n\rangle$ (чаще всего основного с $n = 0$) с соответствующим дискретным спектром энергий $E_n < 0$, где $n = 0, 1, 2, \dots$. Функции $|\Psi_n\rangle$ являются собственными функциями оператора \hat{H} и задача

* E-mail: schipilo.daniil@physics.msu.ru

поиска связанных состояний системы сводится к решению стационарного уравнения Шредингера:

$$\hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle. \quad (2)$$

Для большинства квантовых систем не существует аналитического решения уравнения (2), и необходим численный поиск собственных функций и собственных значений. При этом накладываются высокие требования на точность найденных решений для дальнейшего описания отклика квантовых систем с помощью нестационарного уравнения Шредингера, поскольку неточное определение начального состояния приводит к артефактам в решении уравнения (1).

Известны различные численные подходы к поиску собственных функций и собственных значений стационарного уравнения Шредингера: прямое интегрирование [7] уравнения (2), матричный подход [8], методы мнимого времени [9], спектральный [10], степенной [11] и т.д. С вычислительной точки зрения преимуществом степенных методов является то, что одна и та же аппроксимация гамильтониана используется при решении уравнений (2) и (1), что уменьшает скорость накопления численных ошибок при решении нестационарного уравнения. Также степенной метод свободен от проблемы постановки граничных условий [12, 13] и может применяться как для одномерных, так и для многомерных задач. Однако для квантовых систем с большим количеством связанных состояний задача поиска собственных функций может быть чрезвычайно времязатратной. Ускорения сходимости степенных методов можно добиться, в частности, применяя операторы, являющиеся обратными к гамильтониану [14] либо чебышевскими полиномами от гамильтониана [11], § 16. Рассмотрим второй случай, который является алгоритмически более простым и в некотором смысле более универсальным (обращение оператора Гамильтона возможно, если он аппроксимируется конечными разностями на сетке, но не в случае, когда для вычисления производной используется преобразование Фурье). Кратко изложим идею степенного метода.

Выберем произвольное приближение $|\Psi_n^{(0)}\rangle$ с учетом четности волновой функции n -го состояния и ее убывания в классически запрещенной области. Будем многократно применять к пробной волновой функции некоторый полиномиальный оператор $P(\hat{H})$, собственный базис которого совпадает с базисом \hat{H} . При переходе от k -й к $(k + 1)$ -й итерации получаем

$$|\Psi_n^{(k+1)}\rangle = P(\hat{H})|\Psi_n^{(k)}\rangle. \quad (3)$$

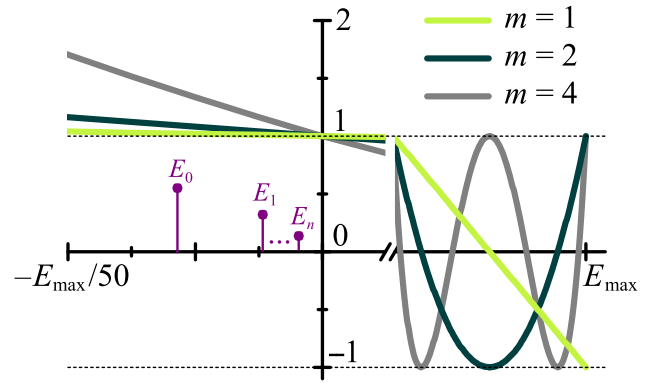


Рис. 1. Зависимость множителя перехода на каждой итерации алгоритма от энергии состояния при использовании полиномов Чебышева различной степени m . Фиолетовыми линиями условно изображены уровни дискретного спектра

Рассмотрим формальное разложение $|\Psi_n^{(k)}\rangle$ по истинному базису $|\Psi_j\rangle$ гамильтониана \hat{H} :

$$|\Psi_n^{(k)}\rangle \propto |\Psi_n\rangle + \sum_{j \neq n} c_j^{(k)} |\Psi_j\rangle,$$

где $c_j^{(k)}$ — коэффициенты разложения по базису $|\Psi_j\rangle$ на k -й итерации. Тогда для приближения на следующей итерации получаем

$$P(\hat{H})|\Psi_n^{(k)}\rangle \propto |\Psi_n\rangle + \sum_{j \neq n} c_j^{(k)} \underbrace{\frac{P(E_j)}{P(E_n)}}_{c_j^{(k+1)}} |\Psi_j\rangle. \quad (4)$$

Таким образом, уменьшение амплитуд при возбужденных состояниях и состояниях континуума (и, соответственно, скорость сходимости степенного алгоритма $|\Psi_n^{(k)}\rangle \rightarrow |\Psi_n\rangle$) определяется значением $\max_{j \neq n} |P(E_j)/P(E_n)|$. Оптимальный степенной алгоритм должен его минимизировать.

В результате применения такого алгоритма и нормировки волновой функции (на каждом шаге) мы получим собственную функцию $|\Psi_n\rangle$ и собственное значение $E_n = \langle \Psi_n | \hat{H} | \Psi_n \rangle$, для которых $P(E_n)$ максимально. После этого алгоритм можно повторять, удаляя из волновой функции проекции на уже найденные состояния с меньшим n :

$$|\Psi_n^{(k+1)}\rangle := |\Psi_n^{(k+1)}\rangle - \sum_{j < n} |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j | \Psi_n^{(k+1)}\rangle,$$

т. е. обеспечивая $c_j = 0$ для $j < n$, и находить более высокие состояния и значения энергии.

Скорость сходимости степенного алгоритма определяется выбранной функцией $P(\hat{H})$ и ее спектром — значениями $P(E_n)$ для всех уровней энергии в заданном потенциале, включая уровни континуума. При этом желательно ограничиться

операторными функциями, являющимися полиномом конечной степени от оператора Гамильтона, ввиду алгоритмической простоты их вычисления (что особенно важно в многомерном случае). Воспользуемся тем, что среди всех полиномов заданной степени m , значения которых на отрезке $[-1, 1]$ по модулю не превосходят 1, полиномы Чебышева первого рода $T_m(\varepsilon) = \cos[m \arccos(\varepsilon)]$ имеют максимальные значения вне этого отрезка. Пусть $E_{max} = \pi^2/(2\Delta x^2)$ — максимальная энергия состояния, соответствующая частоте Найквиста на заданной расчетной сетке с шагом Δx . Выполним линейное преобразование

$$P_m(\varepsilon) = T_m(1 - 2\varepsilon/E_{max}),$$

разместим центр полинома Чебышева T_m в $E_{max}/2$, т. е. перенесем область, где полином $|P_m(\varepsilon)| \leq 1$, из $[-1, 1]$ в диапазон положительных энергий непрерывных состояний $[0, E_{max}]$; для связанных состояний имеем $|P_m(\varepsilon)| \geq 1$, см. рис. 1. Для энергий связанных состояний $-E_{max} \ll E_n < 0$

$$P_m(E_n) \approx T_m(1) + T'_m(1) \frac{2|E_n|}{E_{max}} = 1 + 2m^2 \frac{|E_n|}{E_{max}}, \quad (5)$$

т. е. на каждой итерации амплитуда n -го состояния будет увеличиваться примерно в $1 + 2m^2|E_n|/E_{max}$.

В настоящей работе мы используем степенной алгоритм с операторными полиномами Чебышева для поиска собственных функций и собственных значений одномерного квазикулоновского потенциала (8) с девятью связанными состояниями. Исследована зависимость скорости работы алгоритма от степени полинома Чебышева. «Оптимальная» степень полинома $m \approx 8$ обеспечивает поиск основного состояния $|\Psi_0\rangle$ за $k \approx 125$ итераций (4 с на рабочей станции с процессорами Intel[®] Xeon[®] E5-2630), а связанного состояния с наибольшей энергией $|\Psi_8\rangle$ — за $k \approx 8000$ (при времени расчета около 4 мин). При подстановке найденных волновых функций $|\Psi_n\rangle$ в качестве начальных условий нестационарного уравнения Шредингера (1) без внешнего поля артефактное значение средней координаты электрона отклоняется по модулю от нуля на $\leq 10^{-10}$ за 50 фс.

Будем использовать равномерную сетку по координате x с шагом $\Delta x = 0.125$ и числом узлов $N = 2^{16}$. Это обеспечивает достаточно большую область по x , которая важна для нестационарной задачи и определения поведения компонент волновой функции, соотносящихся с оторванными от атомного остова электронами. Относительно грубое разрешение затрудняет конечно-разностную аппроксимацию второй производной в гамильтониане, поэтому

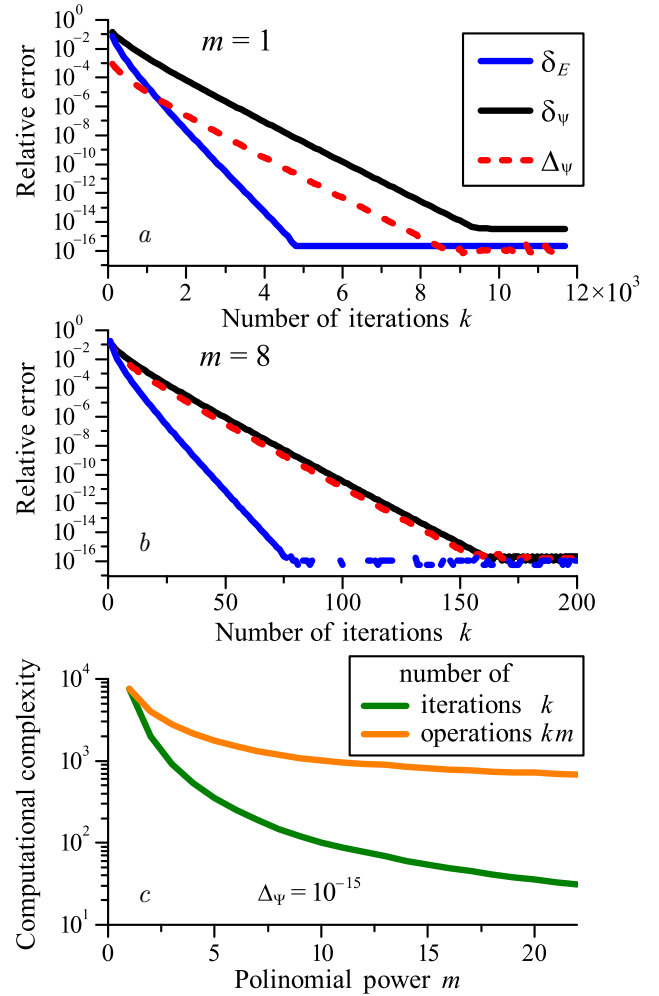


Рис. 2. a, b — Зависимости от номера итерации k относительных ошибок определения волновой функции $\delta_\Psi^{(k)}$ и $\Delta_\Psi^{(k)}$, а также ошибки энергии связанного состояния $\delta_E^{(k)}$ потенциала $U(x) = -\text{ch}^{-2}(x)$. Панель a соответствует степенному алгоритму с полиномом Чебышева $P_1(\hat{H})$, b — с $P_8(\hat{H})$. c — Количество итераций k и количество операций km , необходимых для определения $|\Psi\rangle$ с относительной ошибкой $\Delta_\Psi = 10^{-15}$ для полиномов разных степеней m

для ее определения мы использовали преобразование Фурье.

Для исследования сходимости чебышевского степенного алгоритма рассмотрим потенциал

$$U(x) = -\text{ch}^{-2}(x),$$

для которого известны аналитические выражения для волновой функции

$$\Psi_a(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ch}^{-1}(x)$$

и энергии единственного связанного состояния

$$E_a = -\frac{1}{2} = -13.6 \text{ эВ.}$$

Для определения точности вычисления собственных

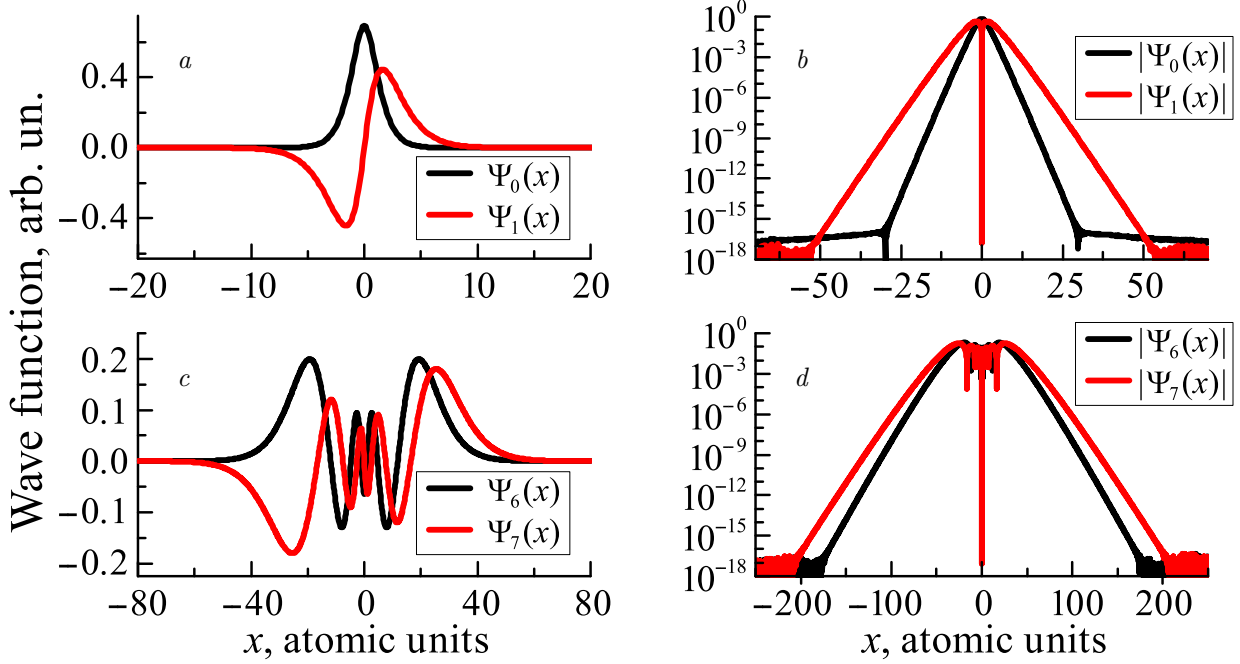


Рис. 3. *a, b* — Волновые функции $\Psi_0(x)$, $\Psi_1(x)$, *c, d* — $\Psi_6(x)$, $\Psi_7(x)$. Рисунок *a, c* построены в линейном масштабе, *b, d* — в полулогарифмическом. Моделирование проводилось для потенциала (8) с использованием полинома Чебышева $P_8(\hat{H})$

функций $\Psi^{(k)}(x)$ в таком потенциале будем использовать относительные ошибки

$$\delta_{\Psi}^{(k)} = \max_i \left| \frac{\Psi_a(x_i) - \Psi^{(k)}(x_i)}{\Psi_a(x_i)} \right| \quad (6)$$

и

$$\Delta_{\Psi}^{(k)} = \max_i \left| \frac{\Psi^{(k)}(x_i) - \Psi^{(k-1)}(x_i)}{\Psi^{(k-1)}(x_i)} \right|. \quad (7)$$

Первое из данных выражений применимо только для потенциалов с известным аналитическим представлением собственной функции, тогда как второе — для поиска собственных функций в произвольном одномерном потенциале. Относительную ошибку определения энергии состояния определим как

$$\delta_E^{(k)} = |(E_a - E^{(k)})/E_a|.$$

На рис. 2*a, b* для полиномов степеней $m = 1$ и $m = 8$ соответственно показаны зависимости от номера итерации k относительных ошибок $\delta_{\Psi}^{(k)}$, $\Delta_{\Psi}^{(k)}$ и $\delta_E^{(k)}$ в исследуемом потенциале. Ошибка определения энергии $\delta_E^{(k)}$ с ростом k убывает быстрее, чем $\delta_{\Psi}^{(k)}$ и $\Delta_{\Psi}^{(k)}$, поэтому в дальнейшем мы будем оценивать скорость выполнения алгоритма через ошибки определения волновой функции. Ошибки $\delta_{\Psi}^{(k)}$ и $\Delta_{\Psi}^{(k)}$ убывают с одинаковым показателем экспоненты и практически одновременно достигают «шумов» $\sim 10^{-15}$, связанных с ошибками округления чисел двойной точности (рис. 2*a, b*). Следовательно, условие окончания итерационного алгоритма можно выбирать на основе $\Delta_{\Psi}^{(k)} \approx 10^{-15}$.

С ростом степени полинома m количество итераций, необходимых для достижения одинаковой точности $\Delta_{\Psi} = 10^{-15}$ монотонно убывает на 2 порядка при изменении m от 1 до 24 (см. рис. 2*c*). Однако для выполнения одной итерации алгоритма с использованием полинома $P_m(\hat{H})$ требуется в m раз больше операций, чем для полинома $P_1(\hat{H})$. Поэтому выбор порядка полинома определялся переходом к постоянному значению количества операций km , позволяющих найти $|\Psi\rangle$ с относительной ошибкой $\Delta_{\Psi} = 10^{-15}$, которое в нашем случае составляет

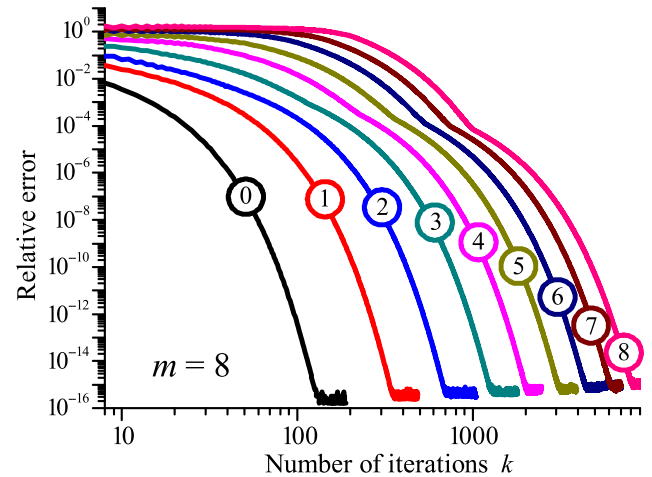


Рис. 4. Относительная ошибка определения волновых функций Δ_{Ψ} в зависимости от числа итераций k для потенциала (8). Цифрами обозначены номера состояний (0 — основное)

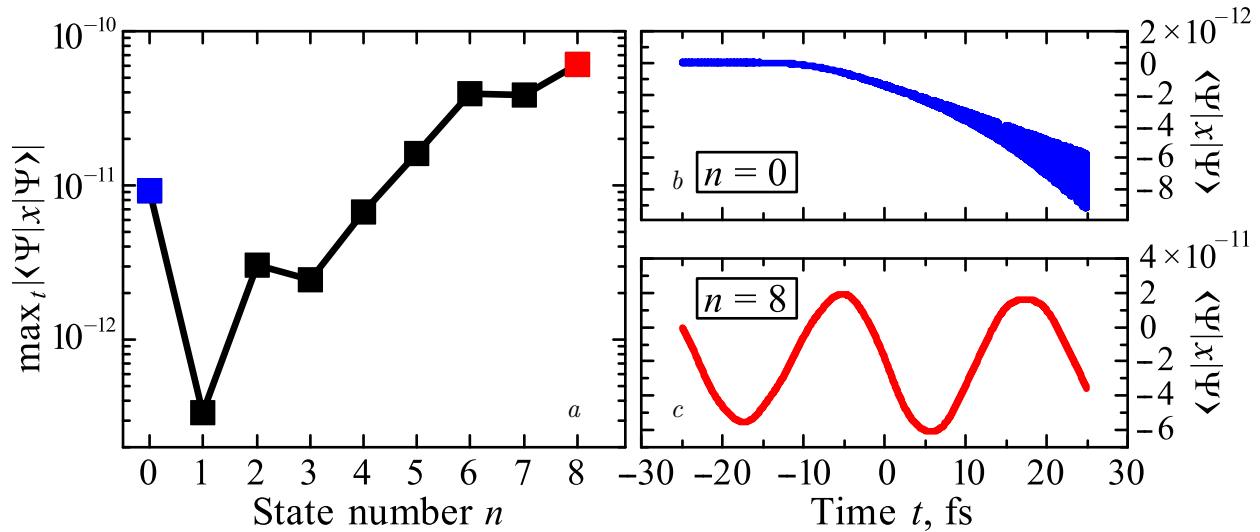


Рис. 5. *a* — Зависимость от номера n связанного состояния потенциала (8) максимального по модулю артефактного отклонения от нуля средней координаты электрона за 50 фс, полученной при численном интегрировании нестационарного уравнения Шредингера (1) в отсутствие внешнего поля ($\hat{H} = 0$) с начальным условием $\Psi(x, t = -\infty) = \Psi_n(x)$. *b, c* — Примеры артефактных зависимостей средней координаты электрона от времени для $n = 0$ и $n = 8$ соответственно

$\sim 10^3$ и достигается при $m \approx 8$. Таким образом, степень полинома Чебышева $m = 8$ является оптимальной с точки зрения практической реализации степенного алгоритма решения стационарного уравнения Шредингера (2).

Теперь применим степенной алгоритм с найденным «оптимальным» значением $m = 8$ к потенциалу $U(x)$, для которого отсутствует аналитическое решение уравнения (2):

$$U(x) = -\frac{A}{\sqrt{x^2 + B^2}} \exp\left[-\left(\frac{x}{C}\right)^{16}\right]. \quad (8)$$

Первый из множителей здесь соответствует квазикулоновскому потенциалу с бесконечным числом уровней [2], тогда как второй делает их число конечным. Чтобы получить достаточно большое количество связанных состояний, мы зафиксировали константу $C = 512$. Далее мы подобрали значения констант $A = 1.13$ и $B = 0.827$ таким образом, чтобы энергия основного состояния соответствовала потенциалу ионизации атома гелия. В полученном потенциале мы нашли девять связанных состояний. Волновые функции основного $\Psi_0(x)$ и некоторых возбужденных $\Psi_1(x)$, $\Psi_6(x)$ и $\Psi_7(x)$ состояний представлены на рис. 3 в линейном (*a, c*) и полупологарифмическом (*b, d*) масштабах соответственно. Энергии этих состояний равны $E_0 = -24.61$ эВ, $E_1 = -9.84$ эВ, $E_6 = -1.20$ эВ и $E_7 = -0.92$ эВ. В согласии с известными аналитическими решениями [15] вне ямы волновые функции $\Psi_n(x)$ убывают пропорционально $\exp(-|x|\sqrt{-2E_n})$ вплоть до «шумов», связанных с ошибками округления (рис. 3*b, d*).

Исследуем сходимость степенного алгоритма для состояний из дискретного спектра с различным квантовым числом n . Для этого рассмотрим рис. 4, на котором представлены зависимости относительной ошибки Δ_Ψ от номера итерации k . При $n = 0$ значение $\Delta_\Psi = 10^{-15}$ достигается за $k \approx 125$ итераций, что соответствует времени выполнения программы 4 с, при $n = 1$ — за $k \approx 340$ итераций и 11 с, а при $n = 8$ значение k возрастает до ~ 8000 и время счета увеличивается до ~ 4 мин (на рабочей станции с процессорами Intel® Xeon® E5-2630).

Мы подставили полученные $\Psi_n(x)$ в качестве начальных условий нестационарного уравнения Шредингера (1) с $\hat{H} = 0$, которое было численно проинтегрировано согласно методике, описанной в работе [16]. Полученное при моделировании среднее значение $\langle \Psi | \hat{x} | \Psi \rangle$ оператора \hat{x} координаты электрона за 50 фс изменяется по модулю на $\leq 10^{-10}$ для всех найденных волновых функций $\Psi_n(x)$, см. рис. 5. Такая величина средней координаты электрона на 6–7 порядков меньше значения $\langle \Psi | \hat{x} | \Psi \rangle$, достигаемого в одномерной квантовой системе под действием импульса с интенсивностью $\sim 1\text{--}100$ ТВт/см² [16]. Это свидетельствует о том, что степенной алгоритм поиска собственных состояний одномерной системы обеспечивает точность определения $|\Psi_n\rangle$, заведомо достаточную для квантовомеханического моделирования эволюции одномерной системы под действием интенсивного ультракороткого импульса.

Итак, мы применили степенной алгоритм, использующий операторные полиномы Чебышева, для определения волновых функций $\Psi_n(x)$ и уровней

энергий E_n связанных состояний одномерных потенциалов с точностью, достаточной для их применения в качестве начальных условий $\Psi(x, t = -\infty) = \Psi_n(x)$ нестационарного уравнения Шредингера. Установлено, что с ростом степени полинома m сходимость степенного метода улучшается: число необходимых для достижения заданной точности итераций k быстро уменьшается. Однако число операций km вычисления гамильтониана уменьшается гораздо медленнее, практически стремясь к постоянному значению при $m \geq 8$. Таким образом, применение в степенном методе поиска связанных состояний полиномов Чебышева со степенью выше восьмой представляется избыточным.

Финансирование. Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (грант № 24-19-00461), <https://rscf.ru/project/24-19-0046/>. Работа Д. Е. Шипило поддержана стипендией Президента РФ молодым ученым и аспирантам (СП-3450.2022.2). Работа И. А. Николаевой, Н. Р. Врублевской и П. Я. Илюшина поддержана стипендиями Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (21-2-10-55-1, 23-2-9-34-1 и 23-2-1-40-1).

ЛИТЕРАТУРА

1. C. Eckart, Phys. Rev. **35**, 1303 (1930).
2. J. Javanainen, J. H. Eberly, and Q. Su, Phys. Rev. A **38**, 3430 (1988).
3. Е. А. Волкова, А. М. Попов, ЖЭТФ **106**, 735 (1994).
4. А. Попов, О. Tikhonova, and Е. Volkova, J. Phys. B **32**, 3331 (1999).
5. M. Kolesik, J. M. Brown, A. Teleki, P. Jakobsen, J. V. Moloney, and E. M. Wright, Optica **1**, 323 (2014).
6. A. Bogatskaya, E. Volkova, and A. Popov, Europhys. Lett. **116**, 14003 (2016).
7. J. Cooley, Math. Comp. **15**, 363 (1961).
8. J. F. Van der Maelen Uría, S. García-Granda, and A. Menéndez-Velázquez, Amer. J. Phys. **64**, 3 (1996).
9. R. Kosloff and H. Tal-Ezer, Chem. Phys. Lett. **127**, 223 (1986).
10. M. Feit, J. Fleck, Jr., and A. Steiger, J. Comput. Phys. **47**, 412 (1982).
11. Р. П. Федоренко. *Введение в вычислительную физику: Учебное пособие для вузов*, под ред. А. И. Лобанова, Издательский дом «Интеллект», Долгопрудный (2008).
12. X. Antoine, A. Arnold, C. Besse, M. Ehrhardt, and A. Schädle, Commun. Comput. Phys. **4**, 729 (2008).
13. X. Antoine, C. Besse, M. Ehrhardt, and P. Klein, *Modeling Boundary Conditions for Solving Stationary Schrödinger Equations*, Preprint 10/04 of the Chairs of Applied Mathematics & Numerical Analysis and Optimization and Approximation, University of Wuppertal, February (2010).
14. M. Nurhuda and A. Rouf, Phys. Rev. E **96**, 033302 (2017).
15. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика: Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989).
16. Н. Врублевская, Д. Шипило, И. Николаева, Н. Панов, О. Косарева, Письма в ЖЭТФ **117**, 400 (2023).