

01;02

Разработка алгоритма гидродинамического анализа эволюции квантовых систем в расширяющемся пространстве

© С.Ю. Овчинников¹, А.А. Смирновский^{1,2}, А.А. Шмидт¹¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

E-mail: smirta@mail.ru

Поступило в Редакцию 10 декабря 2015 г.

Предложен метод расчета спектра ионизированных электронов на основе решения уравнения эволюции квантовых систем в расширяющемся пространстве в гидродинамическом представлении. На ряде одномерных тестовых задач показано, что разработанный численный алгоритм дает удовлетворительные по точности результаты для гладких начальных распределений, однако требует улучшения в случае, когда волновая функция системы содержит нули.

Исследование движения электронов при наличии зависящих от времени внешних полей на расстояниях от микроскопических до макроскопических имеет большой фундаментальный интерес с начала развития квантовой механики. Измерения параметров движения электронов обычно проводятся на большом удалении от области взаимодействия, а используемые для этих целей приборы (например, такие как детекторы частиц или фотонов) также имеют макроскопические размеры. Для определения связанных квантовых состояний используются стандартные численные методы решения квантовых уравнений, однако их использование для сплошного спектра сопряжено с большими трудностями в связи с наличием в волновой функции осциллирующего множителя $\exp(ir^2/(2t))$, где r — координата электрона, t — время. Наличие этого множителя следует из пропагатора для свободной квантовой частицы. Поскольку такой множитель в фазе волновой функции приводит к расходимости на больших расстояниях, возникают как фундаментальные, так и численные трудности. Даже с самыми мощными на сегодняшний день компьютерами расчет распространения

на больших временах без какого-либо учета возникающей сингулярности невозможен. Одним из подходов для решения данной проблемы является удаление сильно осциллирующих фаз аналитически путем преобразования переменных для так называемого расширяющегося пространства и соответствующего масштабирования времени, а также с использованием гидродинамического представления.

Связь между гидродинамикой и квантово-механической эволюцией была обнаружена очень рано: Маделунг [1] дал первую гидродинамическую интерпретацию квантовой механике (меньше чем через год после появления уравнения Шредингера). Пять лет спустя Дирак [2] стал первым, кто связал появление нулей волновой функции с возникновением вихрей. Затем, в 1952 году авторы [3] показали, что решение нестационарного уравнения Шредингера представляет собой движение сжимаемой идеальной жидкости, описываемое уравнениями Навье–Стокса. Примечательной особенностью такого гидродинамического подхода является то, что сплошной спектр может быть вычислен с заданной точностью. Теоретические [4,5] и экспериментальные [6] исследования нескольких простых систем связанных атомов показывают возникновение гидродинамических вихрей при взаимодействиях на атомных масштабах, которые сохраняются и при удалении на макроскопические расстояния; эти примеры показывают, что гидродинамическое и обычное представления квантовой механики могут взаимно дополнять друг друга. В данной статье приводится формулировка и тестирование численного алгоритма решения гидродинамических квантовых уравнений в расширяющемся пространстве.

Решение уравнения Шредингера (1) (записано в атомных единицах) в расширяющемся пространстве основывается на преобразовании переменных (2) Соловьева и Виноцкого [7,8]

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \psi - U \psi = 0, \quad (1)$$

$$q = \frac{r}{R(t)}, \quad \tau = \int_{-\infty}^t \frac{dt}{R^2(t)}, \quad \psi(r, t) = R^{-N/2}(\tau) \exp\left(\frac{i\dot{R}(\tau)}{2R(\tau)} q^2\right) \varphi(q, \tau). \quad (2)$$

В этом преобразовании под R понимается произвольная заданная функция (показатель степени N в преобразовании волновой функции соответствует размерности координатного пространства). Для того чтобы

получить преобразованное уравнение Шредингера в расширяющемся пространстве, достаточно положить $R(t) = \Omega t$, откуда

$$q = \frac{r}{\Omega t}, \quad \tau = -\frac{1}{\Omega^2 t}, \quad R(\tau) = -\frac{1}{\Omega \tau},$$

$$\psi(r, t) = \Omega^{N/2} (-\tau)^{N/2} \exp\left(-\frac{iq^2}{2\tau}\right) \varphi(q, \tau), \quad (3)$$

и в результате преобразования переменных получим уравнение (4), которое по форме совпадает с уравнением (1), за исключением модификации слагаемого с потенциалом

$$i \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + \frac{1}{2} \nabla^2 \varphi - \frac{1}{\Omega^2 \tau^2} U\left(-\frac{q}{\Omega \tau}\right) \varphi = 0. \quad (4)$$

Необходимо отметить, что при указанном преобразовании (3) момент времени $t \rightarrow \infty$ соответствует $\tau \rightarrow -0$, поэтому слагаемое с потенциалом для ограниченной в пространстве функции U (которая обычно имеет место при рассмотрении процессов ионизации) обращается в δ -функцию, что приводит к невозможности численно рассчитать уравнение (4) вплоть до $\tau = 0$ и к возрастанию погрешностей расчета при $q \rightarrow 0$. Также стоит отметить, что при $\tau \rightarrow -0$ из решения уравнения (4) как раз определяется сплошной спектр квантового состояния, тогда как все связанные состояния коллапсируют. Таким образом, при указанной замене переменных можно определить спектр ионизированных электронов „на бесконечности“.

Для формулировки метода при гидродинамическом описании эволюции квантовой системы необходимо перейти от уравнений (1) и (4) к уравнениям Маделунга, которые для новых переменных имеют вид (5)

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial \tau} + \nabla(\tilde{\rho} \tilde{V}) = 0, \quad \frac{\partial \tilde{V}}{\partial \tau} + \tilde{V} \nabla \tilde{V} = -\frac{1}{\Omega^2 \tau^2} \nabla U\left(-\frac{q}{\Omega \tau}\right) - \nabla \tilde{Q},$$

$$\tilde{Q} = -\frac{1}{2} \frac{\nabla^2 \sqrt{\tilde{\rho}}}{\sqrt{\tilde{\rho}}}. \quad (5)$$

В гидродинамическом представлении преобразование переменных (3) записывается в виде (6)

$$\tilde{\rho}(q, \tau) = \frac{1}{\Omega^N |\tau|^N} \rho(r, t), \quad \tilde{V}(q, \tau) = -\frac{1}{\Omega \tau} V(r, t) + \frac{q}{\tau}. \quad (6)$$

Таким образом, численный алгоритм решения задачи эволюции квантовой системы (непосредственно после процесса ионизации) в расширяющемся пространстве можно сформулировать следующим образом (далее полагается $\Omega = 1$ в атомных единицах):

1. При помощи уравнений Маделунга (или уравнения Шредингера) в исходных координатах производится расчет эволюции квантовой системы от момента ионизации ($t = 0$) до момента времени $t = 1$.

2. В момент времени $t = 1$ производится преобразование переменных в гидродинамическом представлении по формулам (6), при этом $\tau = -1$.

3. Производится расчет в расширяющемся пространстве от $\tau = -1$ до некоторого близкого к нулю значения на основе уравнений Маделунга (5) для новых переменных.

4. Как показано в [9], получаемое в пределе при $\tau \rightarrow -0$ решение в новых переменных представляет собой распределение по импульсам для ионизированных частиц.

Для реализации предложенного выше алгоритма расчета эволюции квантовой системы в расширяющемся пространстве был использован свободно распространяемый пакет OpenFOAM 2.3, предназначенный для численного решения дифференциальных уравнений в частных производных по методу конечного объема. При дискретизации системы (5) и соответствующей ей системы в исходных переменных использовалась полунеевая схема: сначала решалось уравнение неразрывности со скоростью, взятой с предыдущего временного шага, затем решалось второе уравнение системы (5) относительно скорости с рассчитанной на первом шаге плотностью. При этом (в связи с наличием сингулярности в квантовом потенциале Q) для стабильности расчета в уравнение для скорости вводилась малая искусственная диссипативная добавка, аналогичная вязкому слагаемому в уравнениях Навье–Стокса (как показали дополнительные исследования, при достаточно малом коэффициенте искусственной вязкости эта добавка не влияет на решение).

Для верификации разработанного численного метода были рассмотрены одномерные задачи, имеющие аналитическое решение: распространение волнового пакета в свободном пространстве и эволюция волнового пакета в потенциальной яме.

Задача о распространении гауссова волнового пакета в одномерном свободном пространстве имеет следующие аналитические решения для плотности вероятности в обычном и расширяющемся пространствах

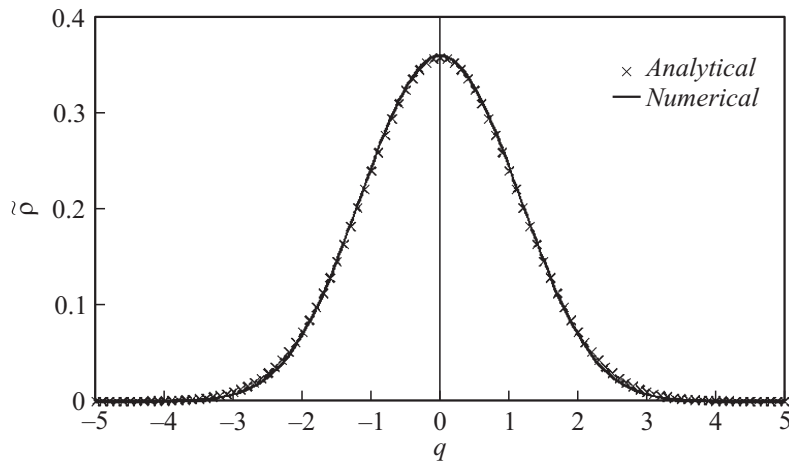


Рис. 1. Задача о расплывании гауссова волнового пакета в свободном пространстве: распределение плотности вероятности при $\tau = 0$.

(в безразмерном виде):

$$\rho(x, t) = \left(\pi \sigma^2 \left(1 + \frac{\tau^2}{\sigma^4} \right) \right)^{-1/2} \exp \left(-\frac{x^2}{\sigma^2 (1 + \tau^2 / \sigma^4)} \right),$$

$$\tilde{\rho}(q, \tau) = \sqrt{\frac{\sigma^2}{\pi (1 + \sigma^4 \tau^2)}} \exp \left(-\frac{\sigma^2 q^2}{1 + \sigma^4 \tau^2} \right).$$

Сравнение аналитического и численного решения при $\tau = 0$ приведено на рис. 1 (для значения $\sigma^2 = 0.4$).

Более приближенной к практическим приложениям задачей является задача об эволюции квантового волнового пакета в потенциальной яме, описываемой потенциалом

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & -a < x < a, \\ 0, & |x| > a. \end{cases} \quad (7)$$

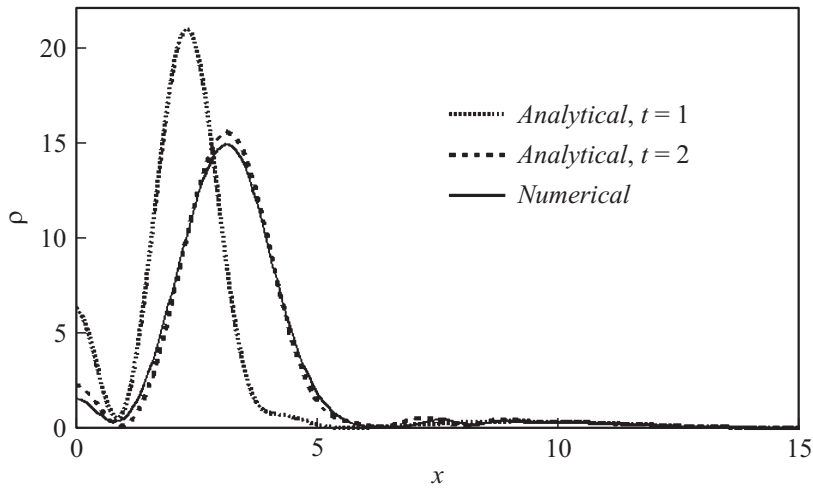


Рис. 2. Задача об эволюции волнового пакета в потенциальной яме, сравнение аналитического решения и численного расчета уравнений Маделунга в расширяющемся пространстве.

Аналитическое решение для ненормированных симметричных собственных волновых функций сплошного спектра записывается в виде

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \cos(k_1 x), & -a < x < a, \\ \cos(k_1 a) \cos(k_2(|x| - a)) - \frac{k_1}{k_2} \sin(k_1 a) \sin(k_2(|x| - a)), & |x| > a, \end{cases} \quad (8)$$

$$k_1 = \sqrt{2(E + U_0)}, \quad k_2 = \sqrt{2E}.$$

Для расчета с использованием гидродинамического представления (5) вместо образующейся при дифференцировании потенциала (7) дельта-функции использовалась ее аппроксимация гауссовой функцией

$$\frac{\partial U}{\partial x} = \alpha U_0 \exp(-\pi \alpha^2 (|x| - a)^2) \text{sign}(x),$$

где значение α выбиралось исходя из размера ячейки сетки.

При сравнении решения, полученного при помощи численного решения (5), с аналитическим решением (8) выяснилось, что используемая численная схема дает плохое разрешение вблизи узлов волновой

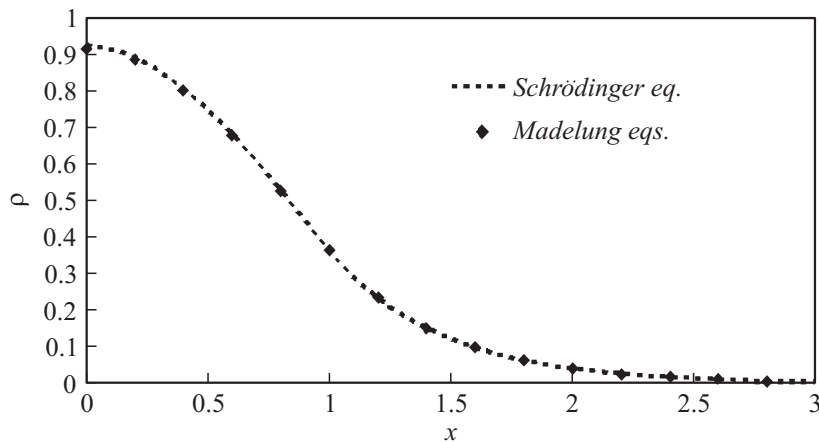


Рис. 3. Задача об эволюции гауссова волнового пакета в потенциальной яме: распределение плотности вероятности, полученное при численном решении уравнения Шредингера и уравнений Маделунга в расширяющемся пространстве при $t = 10$.

функции, и накапливающаяся погрешность численного расчета приводит к сильному его отличию от аналитического решения. В качестве иллюстрации на рис. 2 представлены аналитические решения при $t = 1$ и $t = 2$, а также результат численного расчета от начального условия при $t = 1$ до $t = 2$. Параметры потенциала выбирались равными $U_0 = 1$, $a = 1$. Аналитическое решение представляет собой следующую суперпозицию собственных функций:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{300} \psi_E(x) e^{-iEt}, \quad E = 0.08 + 0.04n.$$

В связи с описанной выше проблемой был также проведен численный расчет с начальным условием в виде гауссова пакета

$$\rho_0(x) = \exp(-x^2).$$

Результаты численного моделирования уравнения (5) сравнивались с численным же расчетом, но на основе дискретизации уравнения

Шредингера (1). Сравнение распределений плотности вероятности в момент времени $t = 10$ представлено на рис. 3. Таким образом, можно заключить, что расчет гладких распределений в гидродинамическом представлении дает хорошую точность в сравнении с решением уравнений Шредингера.

Предложен оригинальный алгоритм численного анализа эволюции квантовых систем в расширяющемся пространстве на основе гидродинамического представления уравнения Шредингера. Предложенный подход позволяет рассчитывать спектр ионизированных электронов „на бесконечности“ без необходимости учета в волновой функции осциллирующего множителя, который возникает при численном расчете уравнений Шредингера. Однако при использовании гидродинамического представления возникают проблемы, связанные с наличием нулей волновой функции, для решения которой необходимо привлекать более точные схемы дискретизации уравнений Маделунга. В целом начальное тестирование разработанного алгоритма показывает хорошее согласие получаемых численных решений с известными аналитическими решениями и численными решениями на основе уравнений Шредингера.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 15-02-07794.

Список литературы

- [1] Madelung E. // Z. Phys. 1926. V. 40. P. 332.
- [2] Dirac P.A.M. // Proc. Roy. Soc. A. 1931. V. 133. P. 60.
- [3] Takabayashi T. // Prog. Theor. Phys. 1952. V. 8. P. 143.
- [4] Ovchinnikov S.Y., Macek J.H., Schultz D.R. // Phys. Rev. A. 2014. V. 90. P. 062713.
- [5] Ngoko Djioke J.M., Hu S.X., Madsen L.B., Manakov N.L., Meremianin A.V., Starace A.F. // Phys. Rev. Lett. 2015. V. 115. N 11. P. 113004.
- [6] Schmidt L.Ph.H., Goihl C., Metz D., Schmidt-Böcking H., Dörner R., Ovchinnikov S.Yu., Macek J.H., Schultz D.R. // Phys. Rev. Lett. 2014. V. 112. P. 083201.
- [7] Ovchinnikov S.Yu., Ogurtsov G.N., Macek J.H., Gordeev Yu.S. // Phys. Reports. 2004. V. 389. N 3. P. 119–159.
- [8] Soloviev E.A., Vinitzky S.I. // J. Physics B. 1985. V. 18. N 16. P. L557.
- [9] Dynamical Processes in Atomic and Molecular Physics / Ed. by D. Ogurtsov, D. Dowek. Bentham e-books, e-edition. 2012. 127 p.