

01

Поглощающий оптический потенциал на основе функций косинуса для моделирования квантовой динамики методом сеток Фурье в пакете Optimizer

© В.Б. Совков^{1,2}, Jizhou Wu², and Jie Ma²

¹ Санкт-Петербургский государственный университет,
199034 Санкт-Петербург, Россия

² State Key Laboratory of Quantum Optics and Quantum Optics Devices,
Institute of Laser Spectroscopy, Shanxi University,
030006 Taiyuan, China

e-mail: v.sovkov@spbu.ru, wujz@sxu.edu.cn, mj@sxu.edu.cn

Поступила в редакцию 21.01.2022 г.

В окончательной редакции 05.02.2022 г.

Принята к публикации 10.02.2022 г.

В целях моделирования спектроскопических и столкновительных свойств квантовых систем предложен и исследован новый комплексно-значный поглощающий оптический потенциал, основанный на комбинации косинусов. Такая функция обеспечивает высокую степень гладкости ее сшивки с физическим вещественно-значным потенциалом. Свойства этой функции исследованы в терминах ее влияния на динамику квантового волнового пакета, свободную вне области действия оптического потенциала. Для этого использованы наши программы метода сетки Фурье (Fourier Grid Method) в рамках проекта Optimizer, доступные в виде открытых кодов Matlab на <https://sourceforge.net/projects/optimizer-sovkov/>.

Ключевые слова: квантовая динамика, поглощающие граничные условия, оптический потенциал, метод сетки Фурье, спектроскопия ультрахолодных ансамблей.

DOI: 10.21883/OS.2022.05.52418.7-22

1. Введение

Стационарные и нестационарные уравнения Шрёдингера [1] всегда были в центре особого внимания теоретической и вычислительной физики и химии, и было разработано множество эффективных методов, алгоритмов и компьютерных программ для их решения. Однако, поскольку они составляют основу нерелятивистской квантовой механики и дают ключ к количественному описанию и прогнозированию перспективных современных экспериментов, численное решение этих уравнений представляет большой интерес как в настоящий момент, так и в обозримом будущем.

Новые экспериментальные цели и методы породили новые требования к таким методам и программам. Например, в последние годы спектроскопические исследования фотоассоциации ультрахолодных атомов [2–4] привлекли значительное внимание. Ожидается, что подобные эксперименты позволят создавать молекулярные ансамбли в экзотических состояниях (и в определенной степени уже сделали это), такие как молекулы в их абсолютных (т.е. по всем степеням свободы) основных состояниях [5,6], квантовые газы и жидкости из этих молекул [7–9] и т.д. Помимо очевидного интереса к этим системам с точки зрения фундаментальной физики, они представляются очень перспективными для применений в таких областях, как полностью контролируемые квантовые химические реакции [10], высокоточные из-

мерения [11–13], разработка квантовых компьютеров и квантовых информационных систем [14,15].

Вероятно, наиболее многообещающим способом повышения эффективности фотоассоциации и, следовательно, увеличения производства таких объектов является использование управляемых магнитным полем резонансов Фешбаха вблизи предела диссоциации [16–19].

Резонансы Фешбаха принадлежат непрерывному спектру, и те из них, которые представляют интерес в обозначенном смысле, лежат в диапазоне очень низких энергий (типичные температуры ультрахолодных ансамблей атомов могут быть $\sim 1 \mu\text{K}$ и ниже). В непрерывном спектре волновой пакет эволюционирует в бесконечном диапазоне пространственной координаты, который, разумеется, не может быть строго представлен численно. Одним из способов преодоления этой трудности является введение искусственных поглощающих (демпфирующих) граничных условий или оптических потенциалов [20], подавляющих амплитуды волнового пакета на границах физически важного пространственного интервала. Эффективность этого демпфирования зависит от типа поглощающей функции и продолжительности области ее действия: ее длина не должна быть заметно меньше длины осцилляции плоской волны (волны де Бройля) с интересующей энергией. Низкоэнергетические резонансные состояния Фешбаха демонстрируют исключительно длинные осцилляции волновой функции (сотни радиусов Бора и более), что требует использо-

вания очень продолжительных зон затухания. Изучение различных типов поглощающих функций и способов их применения помогает уменьшить размер этих зон или, по крайней мере, оценить ожидаемые вычислительные ошибки от подобного уменьшения.

В целом резонансные явления, в том числе резонансы Фешбаха, чрезвычайно важны в различных областях квантовой физики и химии, включая теорию рассеяния, спектроскопию и т.п., где очень востребованы поглощающие функции (оптические потенциалы).

Основные цели выполненного в настоящей работе исследования.

- Описание новой поглощающей функции (оптического потенциала) тригонометрического типа (на основе косинусов), которая, насколько нам известно, никогда ранее не использовалась в обозначенных выше задачах.

- Представление и краткое описание нашей компьютерной программы на языке Matlab для решения одномерных многоканальных уравнений Шрёдингера с использованием (картированного) метода сетки Фурье, адаптированной для использования с нашим пакетом Optimizer [21].

- Численное исследование свойств и возможностей поглощающей функции тригонометрического типа с помощью нашей программы сетки Фурье. В частности, мы исследовали способность новой поглощающей функции обеспечить корректное описание квантовой динамики при использовании сравнительно коротких зон поглощения (сопоставимых или короче длины волны де Бройля) с перспективой моделирования резонансов Фешбаха атомных пар при разумных вычислительных затратах без существенной потери точности.

Все компьютерные программы, использованные в нашей работе, вместе с детальными описаниями и воспроизводимыми примерами доступны для бесплатного скачивания ([21] и разд. 4 ниже).

В ходе нашего исследования нам встретилась относительно недавняя работа [22], в которой также рассматривалась поглощающая функция, построенная из косинусов, где она применялась для расчетов в теории когерентного управления. Хотя авторы [22] не представили всех подробностей по этой функции, пообещав сделать это позже в отдельной публикации, из контекста ясно, что она сильно отличается от описанной в настоящей статье. В отличие от нашего подхода, они сконструировали ее мнимую часть как отрицательный квадрат оборванного тригонометрического ряда, а действительную часть — как другой аналогичный ряд, и оптимизировали коэффициенты этих рядов в смысле минимизации эффектов пропускания и отражения; условия гладкости в точках сшивки, которые важны в нашей работе, не анализировались. Мы надеемся, что оба подхода найдут свое применение, не противореча друг другу. С другой стороны, сам факт публикации цитируемой статьи свидетельствует о возросшем интересе к поглощающим функциям и оптическим потенциалам (несмотря на долгую историю вопроса) благодаря новым разработкам

во многих областях, включая теорию оптимального когерентного управления, как в [22], и спектроскопию ультрахолодных ансамблей, как в настоящей статье.

Мы предполагаем, что, хотя для представленных далее результатов по поглощающей функции тригонометрического типа использование наших программ метода сетки Фурье было необходимо, части читателей будут интересны только физическими аспекты, а части — только программное обеспечение. Первые могут игнорировать разд. 4 „Программная реализация“ без ущерба для физической картины, в то время как вторые могут сосредоточить свое внимание на этом разд. 4 вместе с цитированными там руководствами по программам, игнорируя остальную материал.

2. Методы

2.1. Физические основы и алгоритмы

Как хорошо известно [1], основные свойства квантовой системы определяются независимыми от времени (стационарными) и зависящими от времени (нестационарными) уравнениями Шрёдингера. Было предложено множество эффективных алгоритмов численного решения уравнений Шрёдингера (например, [23–25]). В настоящей работе мы использовали один из них, известный как метод сетки Фурье [26–32]. Наша реализация этого метода в виде компьютерных программ описана в разд. 4 ниже. Эти программы доступны для свободного скачивания [21] вместе с руководствами на английском и русском языках, в которых подробно описан алгоритм и лежащая в его основе физика.

Когда динамика волнового пакета (предположительно колебательная) происходит полностью в поле связанного потенциала в замкнутой области, не возникает существенных дополнительных трудностей; однако возникают проблемы, когда требуется вычисление динамики свободного (диссоциирующего) состояния, например, при моделировании спектров молекулярной преддиссоциации или резонансов Фешбаха. В этом случае волновой пакет достигает крайней правой границы вычислительной сетки в течение ограниченного времени и вследствие периодического характера преобразования Фурье вторгается в пространственную область (или отражается от нее) на противоположной крайней левой границе, порождая нефизические артефакты в результатах вычислений. В теории преобразования Фурье этот эффект известен как „алиасинг“. Прямолинейное расширение вычислительной сетки таким образом, чтобы волновой пакет не достигал границы в течение требуемого времени (что также обеспечило бы удовлетворительную плотность рассчитанных псевдосвязанных состояний), имеет очевидный недостаток необоснованного увеличения необходимых вычислительных ресурсов (хотя это возможно в некоторой степени в рамках алгоритма картированной сетки Фурье).

Возможные решения этой проблемы включают введение поглощающих граничных условий или так называемого оптического потенциала. В первом подходе волновая функция (пакет) на каждом следующем временном шаге умножается на функцию, которая актуализируется в определенной окрестности границы и уменьшается по направлению к ней (поглощающую функцию), тем самым предотвращая достижение пакетом этой границы. Во втором подходе мнимое отрицательное слагаемое (или более общее комплексно-значное слагаемое) добавляется к самой потенциальной функции U , гарантируя, что $\exp\{-(i/\hbar)U\delta t\}$ (δt — элементарный временной шаг в пошаговой схеме) ведет себя аналогично, т.е. актуализируется в определенной окрестности границы и уменьшается к ней. Эти подходы практически эквивалентны с точностью до операций логарифма или экспоненты, однако метод оптического потенциала несколько более общий, поскольку поглощающая функция может быть применена только в том случае, когда динамика вычисляется пошагово, что не всегда так. Физически поглощающий барьер сохраняет способность пропускать и отражать некоторую часть волнового пакета и параметры этого барьера должны быть отрегулированы таким образом, чтобы коэффициенты пропускания и отражения оказались минимальными.

Были предложены и проанализированы различные формы поглощающих функций или оптических потенциалов. Представительный обзор соответствующих работ, опубликованных до 2004 г., предложен в [20]; некоторые из них [33–39] имеют непосредственное отношение к нашему исследованию (обратите внимание, что ссылка на [39] была пропущена в [20]). Несколько примеров более поздних публикаций на эту тему [22,40–44]. Мы также хотели бы упомянуть работы [45–48], исследовавшие искусственные граничные условия с несколько иных точек зрения (техника комплексного масштабирования, техника функций Грина).

Было обнаружено [20,33,34], что свойства поглощающей функции контролируются единственным управляющим параметром длины $\lambda = 2\pi\hbar/\sqrt{2mE}$ осцилляции плоской волны (длины волны де Бройля) с энергией E . Другими словами, они универсально выражаются в безразмерных относительных единицах E и λ . Это наблюдение использовалось во многих работах (например, [33,34]), где результаты численных испытаний с некоторыми оптическими потенциалами для конкретной модели породили своего рода общие универсальные рекомендации.

Интересное практически важное обобщение концепции оптического потенциала было представлено в нескольких работах [20,36,37]. Если эффективность оптического потенциала оптимальна для определенной энергии E_0 , он теряет эффективность для других энергий, особенно для тех, которые заметно ниже E_0 . Причина такого поведения довольно очевидна: пространственный диапазон эффективно поглощающего оптического потенциала не должен быть заметно меньше длины

осцилляции волновой функции, так как в противном случае волновая функция просто не регистрирует существование этого барьера. С другой стороны, часть волновой функции в зоне поглощения не имеет ничего общего с реальной физикой процесса и мы можем исказить ее любым удобным для нас способом. Эффективная длина осцилляции низкоэнергетической волновой функции может быть уменьшена путем введения наряду с чисто мнимым поглощающим потенциалом вещественного слагаемого, обеспечивающего уменьшение значений потенциала в этой области. Такой оптический потенциал становится общим комплексно-значным.

2.2. Поглощающая функция и оптический потенциал тригонометрического типа

В наших программах использованы поглощающие граничные условия и оптический потенциал, описанные ниже. Ясно, что любой альтернативный или дополнительный оптический потенциал может быть введен в любой области координат на этапе построения потенциальной функции.

Мы попытались выполнить требование, чтобы функция была как можно более гладкой в том смысле, что максимально возможное число производных низшего порядка в точках сшивки должны быть непрерывными. Оператор эволюции фактически является сложным дифференциальным оператором; в работе [34] показано, что полуклассический коэффициент отражения остается равным нулю вплоть до порядка приближения ВКБ, равного максимальному порядку непрерывной производной на фронте оптического потенциала. Тригонометрические функции обладают хорошо известными свойствами гладкости и их комбинации выглядят перспективными для обеспечения этого требования.

Мы выбрали поглощающую функцию вида

$$f_{k\beta}(z(r)) = \left[\frac{1}{2} + \sum_{n=1}^k c_n \cos((2n-1)\pi z(r)) \right]^\beta, \quad (1)$$

где r — пространственная координата,

$$z(r) = \frac{r - \min(r)}{\max(r) - \min(r)},$$

если требуется убывание в направлении правой границы, или

$$z(r) = \frac{\max(r) - r}{\max(r) - \min(r)},$$

если требуется убывание в направлении левой границы; $\min(r)$ и $\max(r)$ обозначают левую и правую точки в шкале координаты r , где заданные низшие производные функции (1) обращаются в ноль (см. ниже).

Очевидно, что по крайней мере при $\beta = 1$ автоматически обеспечивается равенство нулю всех производных

Таблица 1. Коэффициенты c_n в формулах (1) (комбинациях k косинусов), обеспечивающие непрерывность производных до порядка $2k - 1$ включительно

| k | c_1 | c_2 | c_3 | c_4 |
|-----|-----------|-----------|---------|---------|
| 1 | 1/2 | — | — | — |
| 2 | 9/16 | -1/16 | — | — |
| 3 | 75/128 | -25/256 | 3/256 | — |
| 4 | 1225/2048 | -245/2048 | 49/2048 | -5/2048 |

нечетных порядков на краях интервала $z \in [0, 1]$. Производные четных порядков равны

$$\frac{d^{2q} f_{k1}(z)}{dz^{2q}} = \frac{1}{2} \delta_{q0} + (-1)^q \sum_{n=1}^k c_n ((2n - 1)\pi)^{2q} \cos((2n - 1)\pi z(r)). \quad (2)$$

Следовательно, все производные порядков до $2k - 1$ включительно обращаются в ноль на обоих краях интервала, если выполнено

$$\sum_{n=1}^k c_n = 1/2, \quad \sum_{n=1}^k c_n (2n - 1)^{2q} = 0, \quad (3)$$

где $q = 1, 2, \dots, k - 1$.

Практически важные коэффициенты c_n , найденные из решения этих уравнений, представлены в табл. 1. Случаи $k > 4$ вряд ли представляют практический интерес из-за ограниченной точности цифровых вычислений, хотя и могут быть учтены в наших программах.

При $\beta \neq 1$

$$f_{k\beta}(\delta z) \sim [1 - (\delta z)^{2k}]^\beta \sim 1 - \beta(\delta z)^{2k},$$

$$f_{k\beta}(1 - \delta z) \sim [(\delta z)^{2k}]^\beta = (\delta z)^{2k\beta},$$

и, следовательно, производные до того же порядка $2k - 1$ остаются нулевыми на переднем крае, в то время как на противоположном крае равны нулю производные до порядка $2k\beta - 1$; при $\beta > 1$ это увеличивает степень гладкости функции на заднем крае. Использование функции

$$\tilde{f}_{k\beta}(z) = (1 - f_{k\beta}(1 - z)) \quad (4)$$

обеспечит выполнение последнего свойства на переднем крае.

Чтобы обеспечить согласованное преобразование поглощающей функции в оптический потенциал и наоборот, параметр β должен быть выражен в виде

$$\beta = \alpha E_0 \frac{\delta t}{\hbar}, \quad (5)$$

где E_0 — некоторая заданная (опорная) энергия, а α — регулируемый безразмерный коэффициент в мнимом оптическом потенциале

$$V_{k\alpha}^{Oi}(r) = i\alpha E_0 \ln(f_{k1}(z(r))). \quad (6)$$

Такая же математика подходит для конструирования вещественной (понижающей) части комплексно-значного оптического потенциала. Мы используем

$$V_{ky}^{Or}(r) = \gamma E_0 (f_{k1}(z(r) - 1)), \quad (7)$$

где γ — регулируемый безразмерный коэффициент. Полный комплексно-значный оптический потенциал приобретает вид

$$V_{k\alpha\gamma}^O(r) = V_{k\alpha}^{Oi}(r) + V_{ky}^{Or}(r). \quad (8)$$

Свойства гладкости оптического потенциала на переднем крае, наиболее интересные для нас, такие же, как и у самой поглощающей функции.

Заметим попутно, что функции (1) и (4) могут использоваться для многих других целей, например, при численном дифференцировании методом Фурье-преобразования или для гладкого соединения зависимостей способом аналогичным, но в некотором смысле более общим, чем метод сплайна.

3. Результаты

Ниже представлены результаты численных тестов поглощающих функций (оптических потенциалов), описанных в разд. 2.2, выполненных с помощью наших программ метода сетки Фурье ([21] и разд. 4 ниже). Для этого мы воспользовались моделью простой квантовой динамики (которая была бы свободной в отсутствие поглощающей функции), позаимствованной из работы Vibók и Balint-Kurti [33], а также модифицированной (на наш взгляд, более практической) аналогичной моделью.

В работе [33] Vibók и Balint-Kurti предложили удобную численную модель для изучения свойств различных оптических потенциалов и применили ее к набору таких потенциалов (степеней и экспонент $1/r$). Рекомендации, выработанные в [33], далее были приняты многими исследователями.

В этой модели гауссов волновой пакет со средней энергией E развивался в поле постоянного (нулевого) потенциала, пока не достигал поглощающего барьера, расположенного в ограниченном диапазоне пространственных координат длины $l\lambda_0$ около центра общего диапазона (λ_0 — длина волны де Бройля, l — заданная безразмерная длина зоны поглощения). Пакет частично отражался от барьера и частично проходил сквозь него. По истечении времени t , достаточного для того, чтобы обе части волнового пакета $\psi(r, t)$ достигли областей, удаленных как от барьера, так и от границ вычислительной сетки, оценивались коэффициенты отражения $R = \int_{\{r_-\}} |\psi(r, t)|^2 dr$ и пропускания $T = \int_{\{r_+\}} |\psi(r, t)|^2 dr$, где $\{r_-\}$ и $\{r_+\}$ обозначают пространственные области перед барьером и за ним. Большая часть тестовых вычислений была выполнена для гауссова волнового пакета со средней энергией

$E = E_0 = 0.1$ а.е. и массой $m = 1836.18$ а.е. (использовались атомные единицы Хартри (а.е.)). Пространственный диапазон $l\lambda_0$ зоны поглощения варьировался от $l = 1$ до $l = 15$ и были определены „оптимальные“ параметры оптических потенциалов, минимизирующие сумму $(R + T)$ для этой опорной энергии $E_0 = 0.1$ а.е. с длиной волны де Бройля λ_0 .

Часть наших тестов была выполнена с использованием модели Vibók и Balint–Kurti, но с нашим оптическим потенциалом, описанным в разд. 2.2. Рисунок 1 иллюстрирует эволюцию волнового пакета в этой модели, рассчитанную с помощью наших программ метода сетки Фурье (обратим внимание на логарифмическую шкалу амплитуд волнового пакета). Отраженная и пропущенная части волнового пакета четко различимы.

Наряду с этим мы использовали другую модель (на наш взгляд, более практическую), в которой разместили поглощающую область вблизи крайней правой границы и добавили стенку вблизи крайней левой границы с максимальной амплитудой $100E$, линейно уменьшающейся в логарифмическом масштабе до нуля в диапазоне первых четырех узлов вычислительной сетки. Левая стенка имитирует типичное поведение физических потенциалов взаимодействия атомов в области малых расстояний и предотвращает проникновение остатков волнового пакета в левую область координатной сетки, вместо этого заставляя его отражаться справа. Для количественной характеристики эффективности поглощения в этой модели мы использовали коэффициент искажения $D = \int_{\{r\}} |\psi(r, t)|^2 dr$, где интеграл охватывал весь диапазон $\{r\}$ вычислительной сетки (так что $D = (R + T) \approx R$; на практике он неотличим от коэффициента отражения R благодаря очень короткому диапазону r и очень малым амплитудам волнового пакета за поглощающим барьером). Рисунок 2 иллюстрирует эволюцию волнового пакета в этой модели, рассчитанную с помощью наших программ метода сетки Фурье, аналогично рис. 1.

Обратим внимание на тот факт, что многие значения R, T, D , оцененные подобным образом, настолько малы, что находятся на пределе вычислительной точности. Следовательно, они очень чувствительны к вычислительным деталям (характеристикам сетки, параметрам исходного гауссиана и т.д.). Мы обнаружили, что изменение этих деталей может изменить рассчитанные значения в два раза или даже больше; это вынудило выбрать довольно расточительный набор параметров для обеспечения относительной стабильности наших оценок. Более конкретно, для каждого волнового пакета со средней энергией E выбирали сетку с восемью узлами на осциллиацию стационарной волновой функции с энергией E . Полуширина гауссиана равнялась семи длинам волн этой осцилляции. Центр гауссиана при $t = 0$ располагался в центре диапазона слева от $r = 0$, охватывающего 26 полуширин гауссиана. В модели Vibók и Balint–Kurti длина сетки справа от $r = 0$ также была равна 26

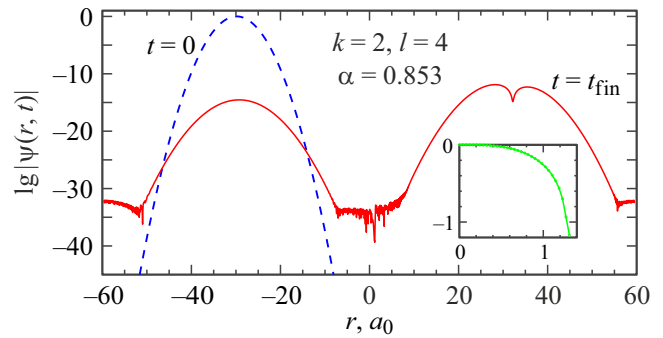


Рис. 1. Десятичные логарифмы локальных амплитуд волнового пакета в моменты времени $t = 0$ и t_{fin} в модели Vibók и Balint–Kurti [33] с оптическим потенциалом тригонометрического типа (разд. 2.2) при $k = 2, l = 4$ и $\alpha = 0.853$ для волнового пакета с энергией $E = E_0 = 0.1$ а.е. Поглощающая область охватывает длину $\sim 1.3 a_0$ (где a_0 — радиус Бора) справа от $r = 0$. На вставке показана мнимая часть оптического потенциала.

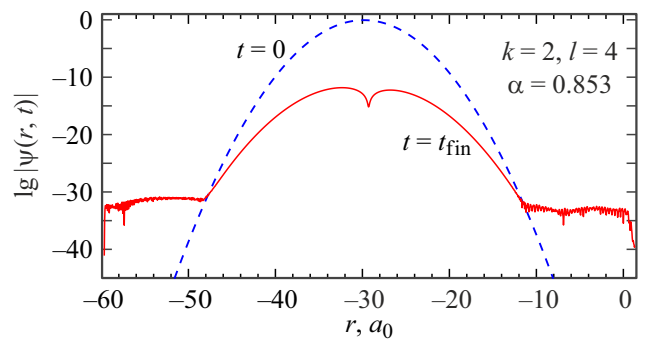


Рис. 2. Десятичные логарифмы локальных амплитуд волнового пакета в моменты времени $t = 0$ и t_{fin} в модели с поглощающим барьером справа и стенкой слева с оптическим потенциалом тригонометрического типа (разд. 2.2) при $k = 2, l = 4$ и $\alpha = 0.853$ для волнового пакета с энергией $E = E_0 = 0.1$ а.е. Поглощающая область охватывает длину $\sim 1.3 a_0$ (где a_0 — радиус Бора) справа от $r = 0$.

полуширинам, в то время как в модели с поглощающим барьером справа и стенкой слева она была ограничена значением $(l + l_+)\lambda_0$ (определяемая пользователем безразмерная длина l охватывает область, где $z(r) \in [0, 1]$, а l_+ — длина дополнительной поглощающей зоны за этой областью — подробности в разд. 4 ниже). Поглощающий барьер был расположен справа от $r = 0$ и охватывал диапазон $(l + l_+)\lambda_0$ в обоих случаях. Время эволюции t_{fin} предварительно вычислялось как время, требующееся для перемещения центра свободно эволюционирующего гауссиана на удвоенное расстояние от его начального местоположения до $r = 0$. Еще раз подчеркнем, что численные оценки, полученные таким образом, следует рассматривать не как точные количественные результаты, а скорее как тенденции, которые в первую очередь проявляются в логарифмической шкале.

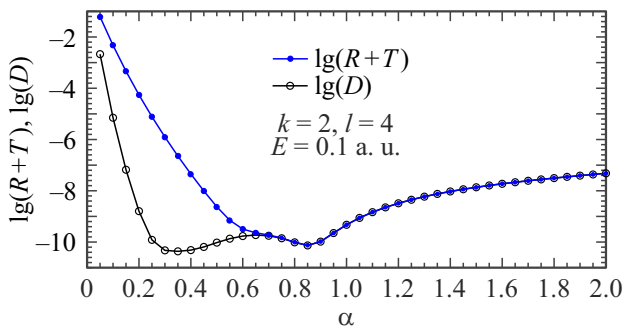


Рис. 3. Десятичные логарифмы суммы $(R + T)$ коэффициентов отражения R и пропускания T в модели Vibók и Balint–Kurti [33] и коэффициента искажения D в модели с поглощающим барьером справа и стенкой слева в зависимости от параметра α оптического потенциала тригонометрического типа (разд. 2.2) при $k = 2$, $l = 4$ для волнового пакета с энергией $E = E_0 = 0.1$ а.у.

В рамках модели Vibók и Balint–Kurti мы выполнили серию вычислений, имитирующих опубликованные в [33], с целью определения „оптимальных“ параметров оптических потенциалов, обеспечивающих минимальность значений $(R + T)$ для определенной энергии $E = E_0$. Эти вычисления были выполнены для оптического потенциала (6) с $k = 1, 2, 3, 4$ и $l = 1–15$, $l_+ = 0$. Результаты представлены в первых четырех столбцах (l , α , R , T) табл. 2. Пятый столбец D — это коэффициент искажения, рассчитанный с такими же параметрами в модели с поглощающим барьером справа и стенкой слева. Последние два столбца — результаты аналогичной оптимизации, обеспечивающей минимальность значений коэффициента искажения D в последней модели.

Из этой таблицы видно, что по сравнению с аналогичными таблицами в [33] эффективность нашего оптического потенциала тригонометрического типа в целом близка к таковой в [33] и несколько лучше при более длинных l . Результаты для $k = 3$ почти полностью превосходят результаты для оптического потенциала $\sim 1/r^4$, рекомендованного в [33], хотя, по нашему мнению, остальные результаты также удовлетворяют большинству практических нужд.

Рисунок 3 иллюстрирует типичную зависимость коэффициентов $R + T$ (в модели Vibók и Balint–Kurti) и D (в нашей альтернативной модели) от параметра α для оптического потенциала (6). Видно, что в области относительно больших α обе кривые похожи друг на друга, но расходятся в области малых α . Как следствие, D -кривая (в нашей альтернативной модели) имеет два минимума, второй из которых очень близок к минимуму $(R + T)$ -кривой (в модели Vibók и Balint–Kurti), однако глобальный минимум расположен в области меньших α .

Обычно интерес представляет диапазон энергий E , а не одно значение $E = E_0$, и желательно, чтобы эффективность поглощения оставалась высокой во всем этом диапазоне. Рисунки 4 и 5 показывают коэффициент

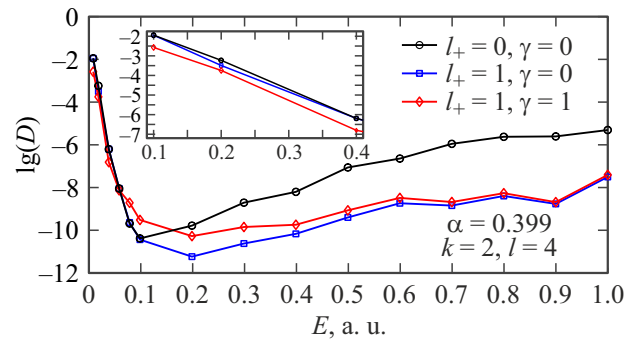


Рис. 4. Десятичные логарифмы коэффициентов искажения D в модели с поглощающим барьером справа и стенкой слева в зависимости от энергии волнового пакета, вычисленные с использованием оптического потенциала тригонометрического типа (разд. 2.2), для $k = 2$, $l = 4$ и $\alpha = 0.399$, оптимизированного в смысле минимизации D при энергии $E_0 = 0.1$ а.у.: чисто мнимый оптический потенциал при $l_+ = 0$ и потенциал, скорректированный путем расширения области поглощения вправо на длину $l_+ = 1$ и путем включения вещественного понижающего слагаемого с глубиной $\gamma = 1$. На вставке показан увеличенный вид крайней левой части графика.

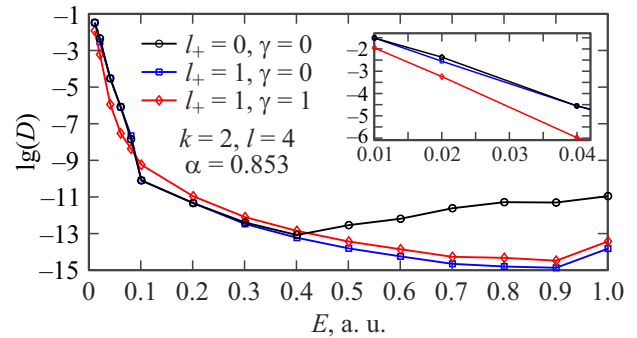


Рис. 5. Десятичные логарифмы коэффициентов искажения D в модели с поглощающим барьером справа и стенкой слева в зависимости от энергии волнового пакета, вычисленные с использованием оптического потенциала тригонометрического типа (разд. 2.2), для $k = 2$, $l = 4$ и $\alpha = 0.853$, оптимизированного в смысле минимизации суммы $(R + T)$ коэффициентов отражения R и пропускания T при энергии $E_0 = 0.1$ а.у.: чисто мнимый оптический потенциал при $l_+ = 0$ и потенциал, скорректированный путем расширения области поглощения вправо на длину $l_+ = 1$ и путем включения вещественного понижающего слагаемого с глубиной $\gamma = 1$. На вставке показан увеличенный вид крайней левой части графика.

искажения D (во второй модели), вычисленный для $k = 2$, $l = 4$ и для значений α , выбранных согласно табл. 2 как D -оптимизированное (первый минимум на рис. 3) и $(R + T)$ -оптимизированное (второй минимум на рис. 3) для энергии $E_0 = 0.1$ а.у., в диапазоне энергий от $E = 0.01$ а.у. до $E = 1$ а.у. (кружки, соединенные сплошными линиями). D -оптимизированная кривая на рис. 4 демонстрирует лучшую эффективность при энергиях, равных или меньших E_0 , в то время как

Таблица 2. Параметры поглощающей функции оптического потенциала тригонометрического типа (разд. 2.2), оптимизированные для минимального значения $(R + T)$ (где R — коэффициент отражения, а T — коэффициент пропускания) с использованием модели Vibók и Balint-Kurti [33], и параметры, оптимизированные для минимального значения коэффициента искажения D в модели с поглощающим барьером справа и стенкой слева; символ „e“ обозначает десятичный порядок

| l | $(R + T)$ -оптимизация | | | | D -оптимизация | | $(R + T)$ -оптимизация | | | | D -оптимизация | |
|-----|------------------------|---------|---------|---------|------------------|---------|------------------------|---------|---------|---------|------------------|---------|
| | α | R | T | D | α | D | α | R | T | D | α | D |
| | $k = 1$ | | | | | | $k = 2$ | | | | | |
| 1 | 1.17 | 5.4e-04 | 7.1e-04 | 7.3e-04 | 0.682 | 3.9e-06 | 0.697 | 1.2e-03 | 2.7e-03 | 2.6e-03 | 0.422 | 9.3e-04 |
| 2 | 2.10 | 5.6e-10 | 2.1e-06 | 2.1e-06 | 0.552 | 1.4e-06 | 0.691 | 2.6e-06 | 6.3e-06 | 6.3e-06 | 0.376 | 3.7e-07 |
| 3 | 0.805 | 7.7e-08 | 4.6e-07 | 4.6e-07 | 0.377 | 1.4e-07 | 0.708 | 4.5e-09 | 1.9e-08 | 1.9e-08 | 0.372 | 2.8e-10 |
| 4 | 0.638 | 1.3e-08 | 9.2e-08 | 9.2e-08 | 0.297 | 2.6e-08 | 0.853 | 3.6e-13 | 7.4e-11 | 7.4e-11 | 0.339 | 4.3e-11 |
| 5 | 0.531 | 3.3e-09 | 2.6e-08 | 2.6e-08 | 0.250 | 7.3e-09 | 0.567 | 2.0e-12 | 1.8e-11 | 1.8e-11 | 0.299 | 5.5e-12 |
| 6 | 0.456 | 1.1e-09 | 9.3e-09 | 9.3e-09 | 0.218 | 2.6e-09 | 0.488 | 2.8e-13 | 2.9e-12 | 2.9e-12 | 0.271 | 1.0e-12 |
| 7 | 0.401 | 4.3e-10 | 3.9e-09 | 3.9e-09 | 0.197 | 1.1e-09 | 0.427 | 5.8e-14 | 6.4e-13 | 6.4e-13 | 0.248 | 2.4e-13 |
| 8 | 0.358 | 1.9e-10 | 1.8e-09 | 1.8e-09 | 0.180 | 5.4e-10 | 0.381 | 1.4e-14 | 1.7e-13 | 1.7e-13 | 0.228 | 6.9e-14 |
| 9 | 0.324 | 9.7e-11 | 9.3e-10 | 9.3e-10 | 0.167 | 2.9e-10 | 0.343 | 4.4e-15 | 5.4e-14 | 5.4e-14 | 0.211 | 2.3e-14 |
| 10 | 0.297 | 5.0e-11 | 5.1e-10 | 5.1e-10 | 0.156 | 1.6e-10 | 0.313 | 1.5e-15 | 1.9e-14 | 1.9e-14 | 0.197 | 8.5e-15 |
| 11 | 0.274 | 2.8e-11 | 3.0e-10 | 3.0e-10 | 0.147 | 9.9e-11 | 0.288 | 5.6e-16 | 7.6e-15 | 7.6e-15 | 0.185 | 3.5e-15 |
| 12 | 0.255 | 1.6e-11 | 1.8e-10 | 1.8e-10 | 0.139 | 6.2e-11 | 0.267 | 2.3e-16 | 3.3e-15 | 3.3e-15 | 0.174 | 1.5e-15 |
| 13 | 0.238 | 1.1e-11 | 1.1e-10 | 1.1e-10 | 0.132 | 4.0e-11 | 0.249 | 9.9e-17 | 1.5e-15 | 1.5e-15 | 0.164 | 7.1e-16 |
| 14 | 0.224 | 6.6e-12 | 7.6e-11 | 7.6e-11 | 0.126 | 2.7e-11 | 0.233 | 4.9e-17 | 7.2e-16 | 7.2e-16 | 0.156 | 3.5e-16 |
| 15 | 0.211 | 4.5e-12 | 5.1e-11 | 5.1e-11 | 0.121 | 1.9e-11 | 0.220 | 2.2e-17 | 3.7e-16 | 3.7e-16 | 0.148 | 1.8e-16 |
| | $k = 3$ | | | | | | $k = 4$ | | | | | |
| 1 | 0.483 | 2.0e-03 | 5.0e-03 | 4.8e-03 | 0.298 | 2.8e-03 | 0.249 | 3.7e-03 | 3.2e-03 | 4.9e-03 | 0.101 | 2.0e-03 |
| 2 | 0.468 | 8.0e-06 | 1.8e-05 | 1.8e-05 | 0.193 | 2.1e-06 | 0.325 | 1.3e-05 | 2.7e-05 | 2.6e-05 | 0.146 | 1.9e-06 |
| 3 | 0.465 | 3.5e-08 | 7.6e-08 | 7.6e-08 | 0.215 | 2.2e-09 | 0.333 | 8.8e-08 | 1.7e-07 | 1.7e-07 | 0.164 | 1.8e-09 |
| 4 | 0.465 | 1.5e-10 | 3.3e-10 | 3.3e-10 | 0.266 | 8.4e-12 | 0.338 | 5.6e-10 | 1.1e-09 | 1.1e-09 | 0.186 | 2.7e-11 |
| 5 | 0.468 | 5.9e-13 | 1.6e-12 | 1.6e-12 | 0.295 | 5.0e-14 | 0.341 | 3.5e-12 | 7.1e-12 | 7.1e-12 | 0.218 | 2.2e-13 |
| 6 | 0.489 | 9.4e-16 | 1.2e-14 | 1.2e-14 | 0.306 | 2.3e-15 | 0.343 | 2.2e-14 | 4.6e-14 | 4.6e-14 | 0.237 | 1.6e-15 |
| 7 | 0.528 | 4.3e-19 | 8.0e-16 | 8.0e-16 | 0.279 | 3.3e-16 | 0.344 | 1.4e-16 | 3.0e-16 | 3.0e-16 | 0.250 | 1.2e-17 |
| 8 | 0.391 | 9.0e-18 | 1.2e-16 | 1.2e-16 | 0.255 | 5.4e-17 | 0.346 | 8.4e-19 | 2.4e-18 | 2.4e-18 | 0.258 | 1.9e-19 |
| 9 | 0.353 | 1.6e-18 | 2.3e-17 | 2.3e-17 | 0.236 | 1.1e-17 | 0.347 | 5.2e-21 | 5.5e-20 | 5.5e-20 | 0.254 | 1.9e-20 |
| 10 | 0.322 | 3.4e-19 | 5.3e-18 | 5.3e-18 | 0.219 | 2.7e-18 | 0.323 | 4.0e-22 | 5.6e-21 | 5.6e-21 | 0.234 | 3.1e-21 |
| 11 | 0.296 | 8.7e-20 | 1.4e-18 | 1.4e-18 | 0.205 | 7.3e-19 | 0.300 | 5.7e-23 | 9.9e-22 | 9.9e-22 | 0.219 | 5.6e-22 |
| 12 | 0.274 | 2.5e-20 | 4.2e-19 | 4.2e-19 | 0.192 | 2.2e-19 | 0.279 | 9.9e-24 | 2.1e-22 | 2.1e-22 | 0.204 | 1.2e-22 |
| 13 | 0.255 | 7.9e-21 | 1.4e-19 | 1.4e-19 | 0.181 | 7.6e-20 | 0.258 | 2.6e-24 | 5.0e-23 | 5.0e-23 | 0.193 | 2.9e-23 |
| 14 | 0.238 | 2.6e-21 | 5.0e-20 | 5.0e-20 | 0.171 | 2.8e-20 | 0.240 | 4.4e-25 | 1.4e-23 | 1.3e-23 | 0.182 | 7.8e-24 |
| 15 | 0.225 | 1.1e-21 | 1.9e-20 | 1.9e-20 | 0.163 | 1.1e-20 | 0.228 | 2.7e-25 | 3.8e-24 | 3.8e-24 | 0.171 | 2.3e-24 |

$(R + T)$ -оптимизированная кривая на рис. 5 лучше при более высоких энергиях. Это наблюдение предопределяет выбор между этими значениями α в зависимости от интересующего диапазона энергий.

Две другие кривые на рис. 4 и 5 иллюстрируют эффект, вызванный расширением диапазона поглощения на величину $l_+ = 1$ как это упоминалось выше и более подробно описано в разд. 4, и эффект, вызванный включением вещественного понижающего слагаемого (7) с $\gamma = 1$. Как и ожидалось, механизм l_+ -расширения в состоянии уменьшить искажение на несколько порядков при более высоких энергиях, в то время как вещественное слагаемое уменьшает искажение примерно на один порядок при более низких энергиях.

Современные спектроскопические эксперименты по фотоассоциации ультрахолодных атомов через околорезонансные резонансы Фешбаха, управляемые магнитным полем [18], имеют дело с очень низкими энергиями или, другими словами, с очень большими длинами волны де Бройля (несколько сотен радиусов Бора или даже больше). Численные тесты, представленные в табл. 2, проводились с длинами зоны поглощения не меньше длины волны де Бройля, что подразумевает использование очень длинных зон поглощения при численном моделировании таких околорезонансных особенностей. Можно заметить, что эффективность коротких ($l = 1$) зон поглощения выше для меньших k , что делает их более перспективными в таких задачах. Чтобы выяснить, насколько короткой может быть зона погло-

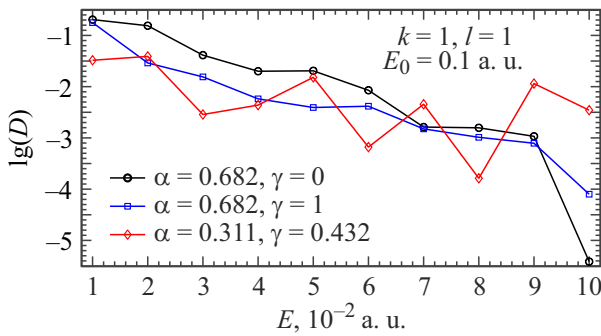


Рис. 6. Десятичные логарифмы коэффициентов искажения D в модели с поглощающим барьером справа и стенкой слева в зависимости от энергии волнового пакета, вычисленные с использованием оптического потенциала тригонометрического типа (разд. 2.2), для $k = 1$, $l = 1$ и α , оптимизированного в смысле минимизации D для энергии $E_0 = 0.1$ а.е. (кружки для $\gamma = 0$ и квадратики для $\gamma = 1$), а также (ромбики) для α и γ , оптимизированных в смысле минимизации суммы квадратов равновзвешенных D во всем показанном диапазоне (т.е. по методу наименьших квадратов).

шения, мы провели следующие вычисления. Для $k = 1$ и $l = 1$ с одинаковой опорной энергией $E_0 = 0.1$ а.е. мы вычислили коэффициенты искажения D для волновых пакетов с 10 равномерно распределенными энергиями в диапазоне от $E = 0.01$ а.е. до $E = 0.1$ а.е. и оптимизировали параметры α и γ в смысле минимизации суммы квадратов всех 10 коэффициентов D , т.е. по методу наименьших квадратов (МНК). Найденные значения оказались $\alpha = 0.311$ и $\gamma = 0.432$. Результат моделирования с такими параметрами сопоставлен с результатами вычислений с D -оптимизированным $\alpha = 0.682$ из табл. 2 при $\gamma = 0$, $\gamma = 1$ на рис. 6. МНК-оптимизация сделала коэффициенты искажений более однородными, несколько улучшив их в области меньших энергий, но ухудшив в области более высоких энергий. Для энергий, заметно меньших, чем показано на рис. 6, мы не смогли получить достаточно малые коэффициенты искажения, и значения остались $D \sim 1$. Для наименьшего $E = 0.01$ а.е. длина зоны поглощения в $\sqrt{10} \approx 3.2$ раза короче длины осцилляции плоской волны. Тем самым можно заключить, что подходящий выбор параметров функции поглощения позволит использовать зону поглощения длиной до $\sim 1/3$ от длины волны де Бройля с характерной погрешностью моделирования в несколько процентов.

4. Программная реализация

Вкратце метод сетки Фурье (Fourier grid method) использует очевидные простые формы дифференциальных операторов p (импульс) и K (кинетическая энергия) в импульсном представлении. Оценки производных, основанные на фурье-преобразовании, обеспечивают гораздо более высокую точность, чем конечно-разностные аппроксимации, что позволяет использовать существенно

меньшие вычислительные сетки. Обратные преобразования Фурье K и p из импульсного в координатное представление могут быть выражены в виде матриц компактной аналитической формы [21,30].

Суммирование K с матрицей U потенциальной энергии (не исключая случай нескольких взаимодействующих каналов) формирует матрицу гамильтониана H в координатном сеточном представлении, которая затем может быть диагонализирована стандартными методами вычислительной математики или возведена в степень (в матричном смысле) для формирования оператора эволюции $\mathcal{T}(t) = \exp(-iHt/\hbar)$, позволяющего рассчитать эволюцию волнового пакета $\psi(t)$ за один временной шаг t .

Одним из сильнейших преимуществ рассматриваемого метода является его способность работать с неэквиливантными сетками (метод сетки Фурье с картированием (mapping) [21,30,49]), которые могут быть построены („оптимизированы“) так, чтобы уменьшить количество узлов в тех областях, где импульсы волновых пакетов малы, что делает сетки в целом намного более компактными. При построении эквидистантных или картированных сеток подразумевается существование верхней границы энергии \mathcal{E} так, чтобы волновые функции состояний ниже \mathcal{E} оказались адекватно представлены на такой сетке.

В основном наша программная реализация метода сетки Фурье эксплуатирует обрисованные идеи и реализует большинство функций, описанных в оригинальных статьях [26–32]. Наиболее существенное отличие состоит в том, что интерфейс программ адаптирован для использования с нашим пакетом Optimizer.

Пакет Optimizer был впервые представлен на конференции [50], хотя мы использовали более ранние версии по крайней мере за два десятилетия до этого (см. заключительную часть настоящего раздела). Исходные коды пакета Optimizer и всех прикладных программ (включая описанные в настоящей статье) на языке Matlab доступны по адресу [21]. Названный пакет представляет собой многофункциональный инструмент для поблочного построения и оптимизации общих математических и физических моделей. Основным методом оптимизации (в общем случае нелинейной) является метод Левенберга-Марквардта [51,52], который основан на разложении по сингулярным значениям (singular value decomposition, SVD) [53] локальной конструкционной матрицы (матрицы Якоби). Пакет поддерживает ряд средств регуляризации, таких как робастные оценки, которые можно использовать вместо использующейся по умолчанию оценки наименьших квадратов, усеченный SVD (в хемометрике principal value regression, PCR), регуляризация Тихонова (в хемометрике ridge regression, RR) и т.д. Поддерживаются параллельные вычисления. Другие функции и правила подробно описаны в руководстве, которые также доступны по адресу [21].

Программа метода (картированной) сетки Фурье полностью написана на языке Matlab. Она способна строить

матрицу гамильтониана и диагонализировать ее (т.е. находить собственные энергии и собственные векторы), используя встроенные функции Matlab „eig“ (традиционный метод диагонализации) или „eigs“ (метод Ланцоша [54,55]). Более подробная информация об этих функциях доступна в справочной системе Matlab и руководствах по программам. Она также может вычислять вращательные константы и парциальные доли многоканальных компонент для каждого собственного состояния. Потенциал $U(r)$ задается в виде вектора (в одноканальном случае) или матрицы (в многоканальном случае) в адиабатическом представлении на пространственной сетке.

Основная программа не включает в себя никаких средств демпфирования, поэтому оптический потенциал (при необходимости) должен быть добавлен к потенциалу $U(r)$ перед его передачей в основную программу. Предусмотрена вспомогательная программа, позволяющая рассчитать и построить оптический потенциал типа (8) с заданными пользователем параметрами k, λ, γ и границами диапазона действия оптического потенциала. В дополнение к области поглощения $l\lambda_0$ (l — определяемый пользователем размер в единицах длины осцилляции плоской волны $\lambda_0 = 2\pi\hbar/\sqrt{2mE_0}$ для некоторой эталонной энергии E_0), соответствующей $z \in [0, 1]$ (т.е. интервал координаты r с границами $\min(r)$ и $\max(r)$ в обозначениях разд. 2.2), мы допускаем возможное изменение этого диапазона до $(l + l_+)\lambda_0$; при $l_+ > 0$ это подразумевает включение области с $z > 1$, в которой в пошаговой схеме волновая функция умножается на ноль.

Оптимизированная картированная сетка (при необходимости) также строится с помощью отдельной вспомогательной программы для любого предопределенного обертывающего (envelope) потенциала [21,30,49] $V(r)$ (может отличаться от физического потенциала $U(r)$).

Другие новшества, отличающие нашу реализацию метода сетки Фурье от предыдущих, описаны ниже.

В представлении картированной координаты гамильтониан $H = K + U$ преобразуется [21,30,49] в

$$\tilde{H} = \tilde{K} + U = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\sqrt{\frac{dx}{dr}} \left[\frac{d}{dx} \right] \sqrt{\frac{dx}{dr}} \right)^2 + U, \quad (9)$$

где r — естественная физическая координата, а x — картированная координата.

В альтернативных реализациях метода картированной сетки Фурье (например, [30,32]) коммутации оператора дифференцирования $[d/dx]$ с $\sqrt{dx/dr}$ выполняются явно в аналитическом виде, в результате чего появляется оператор $[d^2/dx^2]$ и возникает необходимость расчета вторых производных d^2x/dr^2 . Мы не видим необходимости в этом, так как матричное выражение (9) легко вычисляется непосредственно, особенно с помощью высокоэффективной матричной алгебры Matlab. Кроме того, при выполнении итерационных оптимизирующих вычислений нет необходимости пересчитывать матрицу \tilde{K} кинетической энергии (так же как и картированную

координату) на каждом следующем шаге итерации, а в многоканальном случае эта матрица одинакова для всех каналов.

Еще одним нововведением является использование r -зависимой верхней граничной энергии \mathcal{E} при построении „оптимальной“ сетки [21,30,49]. Действительно, нет формальной причины для сохранения ее значения постоянным во всей области, и подходящая зависимость от r в состоянии обеспечить заметное уменьшение числа узлов пространственной сетки без ущерба для физически содержательных аспектов. Мы выбрали такую зависимость в виде

$$\mathcal{E}(r) = [V(r_r) + d\mathcal{E}_r] + [(V(r_l) + d\mathcal{E}_l) - (V(r_r) + d\mathcal{E}_r)] \exp \left[-\epsilon \frac{r - r_l}{r_r - r_l} \right], \quad (10)$$

где r_l и r_r — левая и правая границы координатной сетки, в предположении $V(r_l) > V(r_r)$ (точнее $V(r_l) + d\mathcal{E}_l > V(r_r) + d\mathcal{E}_r$). Параметр ϵ определяет скорость убывания этой функции слева направо; в наших тестовых вычислениях значение $\epsilon = 25$ часто оказывалось оправданным. Величины $d\mathcal{E}_l$ и $d\mathcal{E}_r$ необходимы для исключения искусственных особенностей на границах. При $d\mathcal{E}_l = 0$ и $d\mathcal{E}_r = 0$ все недиагональные граничные элементы матрицы гамильтониана \tilde{H} в картированном представлении (9) равны нулю вследствие $V(r) = \mathcal{E}$, и формальное нефизическое решение задачи собственных значений будет таким, в котором граничный элемент собственного вектора является единственным ненулевым элементом, а собственное значение равно значению потенциала в этой граничной точке [21]. Малые значения этих величин (относительно характерного энергетического масштаба задачи) не приводят к заметному увеличению вычислительной сетки. В малоинтересном случае $V(r_l) + d\mathcal{E}_l \leq V(r_r) + d\mathcal{E}_r$ в качестве \mathcal{E} принимается постоянное значение $V(r_r) + d\mathcal{E}_r$.

При расчетах оптического потенциала возникает следующее техническое затруднение. В выражении (6) могут проявиться точки с очень малыми (близкими нулю) значениями функции $f_{k1}(z(r))$, натуральные логарифмы которых стремятся к минус бесконечности. Хотя Matlab позволяет работать с объектом Inf, некоторые операции с ним недоступны или не вполне корректны. В частности, собственные значения и собственные векторы матрицы, содержащей элементы типа Inf, не могут быть вычислены. Такие величины довольно резко обращаются в минус бесконечность, так что их конечные значения до того, как это происходит, остаются вполне разумными. Чтобы преодолеть указанный недостаток, мы использовали прямую линейную экстраполяцию последних конечных значений оптического потенциала (6); в случае, когда это линейное приближение также обращается в вычислительном смысле в $-\text{Inf}$ (хотя мы не сталкивались с такой ситуацией на практике), такие величины приравниваются последнему вычисленному конечному значению. Описанная процедура заодно проясняет, как

расширение области поглощения до $l + l_+$ реализуется на практике в терминах оптического потенциала.

Как только матрица гамильтониана построена программой (картированной) сетки Фурье, оператор эволюции может быть вычислен с помощью встроенной функции Matlab матричной экспоненты „expm“, позволяя далее рассчитать эволюцию волнового пакета $\psi(t)$. Для этого также предусмотрена отдельная программа.

В работе [30] предлагался алгоритм интерполяции волновой функции, рассчитанной на некоторой координатной сетке, в любую желаемую точку. Этот алгоритм основан на общих свойствах преобразования Фурье и действительно обладает максимально возможной точностью. Однако мы хотели бы подчеркнуть, что в большинстве случаев эта интерполяция не требуется, поскольку без потери точности алгоритма в целом все квантово-механические матричные элементы могут быть аппроксимированы суммами по сетке (аппроксимируемыми теоретически идеальные интегралы). Это ясно из переформулировки бесконечномерной квантово-механической теории возмущений в терминах конечномерной матрицы гамильтониана, используемой в вычислениях. В частности, именно так в наших программах рассчитываются вращательные константы и парциальные доли многоканальных компонент.

В наших предыдущих исследованиях мы регулярно использовали ранние версии программ, описанных здесь. Некоторые примеры применения наших программ сетки Фурье к задачам молекулярной спектроскопии можно найти, например, в [2,56,57]. В пакет, доступный для свободного скачивания [21], включена воспроизводимая тестовая модель, позволяющая адекватно рассчитать колебательную структуру в неадиабатически смешанном комплексе состояний $A^1\Sigma_u^+ \sim b^3\Pi_u$ димера рубидия в рамках 3-канальной модели [58].

Основной пакет Optimizer достаточно широко использовался в разнообразных приложениях [3,59–90].

5. Выводы

Подводя итог, мы предложили новую поглощающую функцию/оптический потенциал, образованный комбинацией косинусов, для квантово-механических расчетов спектроскопических и столкновительных свойств двухчастичной (например, двухатомной) системы. Этот тип функции способен обеспечить высокую степень гладкости шивки с физически содержательной областью. Мы представили программную реализацию (картированного) метода сетки Фурье и описали ее специфические качества. Численные тесты нового оптического потенциала выполнены с использованием нашей программы сетки Фурье, в них продемонстрирована высокая эффективность этого оптического потенциала. Численные тесты показали, что уменьшение длины зоны поглощения до $\sim 1/3$ от длины осцилляции стационарной волновой функции (длины волны де Бройля) при подходящем

выборе параметров оптического потенциала приводит к характерной погрешности в несколько процентов.

Финансирование работы

Авторы благодарят за финансовую и организационную поддержку следующие фонды и программы: National Key R&D Program of China, грант 2017YFA0304203; the National Natural Science Foundation of China (NNSF, ГФЕН), гранты 61722507 и 61675121; 111 project of China, грант D18001; the Program for the Outstanding Innovative Teams of Higher Learning Institutions of Shanxi (OIT); the Applied Basic Research Project of Shanxi Province, грант 201901D211191; the Shanxi 1331 KSC; совместный грант Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) и Государственного фонда естественных наук Китая (ГФЕН, NNSF), грант 62011530047 в ГФЕН и 20-53-53025 в РФФИ.

Список литературы

- [1] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика: нерелятивистская теория* (Наука, М., 1989). [L.D. Landau, E.M. Lifshitz. *Quantum Mechanics. Non-Relativistic Theory* (Pergamon, Oxford–New York–Toronto–Sydney–Paris–Frankfurt, 1977). DOI: 10.1016/C2013-0-02793-4]
- [2] X. Wang, W. Liu, Y. Li, J. Wu, V.B. Sovkov, J. Ma, S. Onishchenko, P. Li, Y. Fu, D. Li, Q. Fan, L. Xiao, S. Jia. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **22**, 3809 (2020). DOI: 10.1039/C9CP05870B
- [3] J. Wu, W. Liu, X. Wang, J. Ma, D. Li, V.B. Sovkov, L. Xiao, S. Jia. *Journal of Chemical Physics*, **148**, 174304 (2018). DOI: 10.1063/1.5023330
- [4] N. Zheng, W. Liu, V.B. Sovkov, J. Xu, G. Ge, Y. Li, P. Li, Y. Fu, J. Wu, J. Ma, L. Xiao, S. Jia. *Optics Express*, **29**(21), 32892 (2021). DOI: 10.1364/OE.437881
- [5] M. Guo, B. Zhu, B. Lu, X. Ye, F. Wang, R. Vexiau, N. Bouloufa-Maafa, G. Quémener, O. Dulieu, D. Wang. *Physical Review Letters*, **116**, 205303 (2016). DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.205303
- [6] X. Ye, M. Guo, M.L. González-Martínez, G. Quémener, D. Wang. *Science Advances*, **4**, eaaq0083 (2018). DOI: 10.1126/sciadv.aaq0083
- [7] N.Y. Yao, M.P. Zaletel, D.M. Stamper-Kurn, A. Vishwanath. *Nature Physics*, **14**, 405 (2018). DOI: 10.1038/s41567-017-0030-7
- [8] N. Goldman, J.C. Budich, P. Zoller. *Nature Physics*, **12**, 639 (2016). DOI: 10.1038/nphys3803
- [9] N.R. Cooper, G.V. Shlyapnikov. *Physical Review Letters*, **103**, 155302 (2009). DOI: 10.1103/PhysRevLett.103.155302
- [10] J.L. Bohn, A.M. Rey, J. Ye. *Science*, **357**, 1002 (2017). DOI: 10.1126/science.aam6299
- [11] I. Kozryyev, N.R. Hutzler. *Physical Review Letters*, **119**, 133002 (2017). DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.133002
- [12] W.B. Cairncross, D.N. Gresh, M. Grau, K.C. Cossel, T.S. Roussy, Y. Ni, Y. Zhou, J. Ye, E.A. Cornell. *Physical Review Letters*, **119**, 153001 (2017). DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.153001

- [13] J. Kobayashi, A. Ogino, S. Inouye. *Nature Communications*, **10**, 3771 (2019). DOI: 10.1038/s41467-019-11761-1
- [14] S.A. Moses, J.P. Covey, M.T. Miecznikowski, D.S. Jin, J. Ye. *Nature Physics*, **13**(1), 13 (2017). DOI: 10.1038/nphys3985
- [15] D. DeMille. *Physical Review Letters*, **88**, 067901 (2002). DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.067901
- [16] N.V. Vitanov, A.A. Rangelov, B.W. Shore, K. Bergmann. *Reviews of Modern Physics*, **89**, 015006 (2017). DOI: 10.1103/RevModPhys.89.015006
- [17] K. Bergmann, H. Theuer, B.W. Shore. *Reviews of Modern Physics*, **70**, 1003 (1998). DOI: 10.1103/RevModPhys.70.1003
- [18] G. Feng, Y. Li, X. Wang, J. Wu, V.B. Sovkov, J. Ma, L. Xiao, S. Jia. *Scientific Reports*, **7**, 13677 (2017). DOI: 10.1038/s41598-017-13534-6
- [19] Y. Li, X. Wang, J. Wu, G. Feng, W. Liu, V.B. Sovkov, J. Ma, B. Deb, L. Xiao, S. Jia. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **23**(1), 641 (2021). DOI: 10.1039/D0CP04840B
- [20] J.G. Muga, J.P. Palao, B. Navarro, I.L. Egusquiza. *Physics Reports*, **395**, 357 (2004). DOI: 10.1016/j.physrep.2004.03.002
- [21] V.B. Sovkov. *Optimizer: source codes and manuals & collection of applications, 2019–2022* [Электронный ресурс]. URL: <https://sourceforge.net/projects/optimizer-sovkov/>
- [22] I. Schaefer, R. Kosloff. *Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics*, **101**, 023407 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevA.101.023407
- [23] B. Schmidt, U. Lorenz. *Computer Physics Communications*, **213**, 223 (2017). DOI: 10.1016/j.cpc.2016.12.007
- [24] B. Schmidt, C. Hartmann. *Computer Physics Communications*, **228**, 229 (2018). DOI: 10.1016/j.cpc.2018.02.022
- [25] B. Schmidt, R. Klein, L.C. Araujo. *Journal of Computational Chemistry*, **40**, 2677 (2019). DOI: 10.1002/jcc.26045
- [26] D. Kosloff, R. Kosloff. *Journal of Computational Physics*, **52**, 35 (1983). DOI: 10.1016/0021-9991(83)90015-3
- [27] J.C. Light, I.P. Hamilton, J.V. Lill. *Journal of Chemical Physics*, **82**, 1400 (1985). DOI: 10.1063/1.448462
- [28] C.C. Martson, G.G. Balint-Kurti. *Journal of Chemical Physics*, **91**, 3571 (1989). DOI: 10.1063/1.456888
- [29] D. Neuhasuer, M. Baer. *Journal of Chemical Physics*, **90**, 4351 (1989). DOI: 10.1063/1.456646
- [30] V. Kokoouline, O. Dulieu, R. Kosloff, F. Masnou-Seeuws. *Journal of Chemical Physics*, **110**, 9865 (1999). DOI: 10.1063/1.478860
- [31] D. Lemoine. *Chemical Physics Letters*, **320**, 492 (2000). DOI: 10.1016/S0009-2614(00)00269-4
- [32] K. Willner, O. Dulieu, F. Masnou-Seeuws. *Journal of Chemical Physics*, **120**, 548 (2004). DOI: 10.1063/1.1630031
- [33] Á. Vibók, G.G. Balint-Kurti. *Journal of Physical Chemistry*, **96**, 8712 (1992). DOI: 10.1021/j100201a012
- [34] Á. Vibók, G.G. Balint-Kurti. *Journal of Chemical Physics*, **96**, 7616 (1992). DOI: 10.1063/1.462414
- [35] U.V. Riss, H.-D. Meyer. *Journal of Chemical Physics*, **105**, 1409 (1996). DOI: 10.1063/1.472003
- [36] J.-Yuan Ge, J.Z.H. Zhang. *Journal of Chemical Physics*, **108**, 1429 (1998). DOI: 10.1063/1.475514
- [37] J.G. Muga, B. Navarro. *Chemical Physics Letters*, **390**, 454 (2004). DOI: 10.1016/j.cpl.2004.04.059
- [38] G.J. Halász, Á. Vibók. *Chemical Physics Letters*, **323**, 287 (2000). DOI: 10.1016/S0009-2614(00)00487-5
- [39] Á. Vibók, G.J. Halász. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **3**, 3048 (2001). DOI: 10.1039/B101900G
- [40] S. Kallush, R. Kosloff. *Chemical Physics Letters*, **433**, 221 (2006). DOI: 10.1016/j.cpl.2006.11.040
- [41] R.E. Wyatt, B.A. Rowland. *Journal of Chemical Theory and Computation*, **5**, 443 (2009). DOI: 10.1021/ct800248w
- [42] Y.-C. Han, K.-J. Yuan, W.-H. Hu, S.-L. Cong. *Journal of Chemical Physics*, **130**, 044308 (2009). DOI: 10.1063/1.3067921
- [43] Y.-C. Han. *International Journal of Quantum Chemistry*, **119**, e25858 (2019). DOI: 10.1002/qua.25858
- [44] E.W.F. Smeets, G. Füchsel, G.-J. Kroes. *Journal of Physical Chemistry C*, **123**, 23049 (2019). DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b06539
- [45] X. Antoine, A. Arnold, C. Besse, M. Ehrhardt, A. Schädle. *Communications in Computational Physics*, **4**(4), 729 (2008). URL: http://global-sci.org/intro/article_detail/cicp/7814.html
- [46] A. Scrinzi. *Physical Review A*, **81**, 053845 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevA.81.053845
- [47] M. Weinmüller, M. Weinmüller, J. Rohland, A. Scrinzi. *Journal of Computational Physics*, **333**, 199 (2017). DOI: 10.1016/j.jcp.2016.12.029
- [48] J. Kaye, L. Greengard. *Transparent boundary conditions for the time-dependent Schrödinger equation with a vector potential, 2019* [Электронный ресурс]. URL: <https://arxiv.org/abs/1812.04200>
- [49] E. Fattal, R. Baer, R. Kosloff. *Physical Review E*, **53**, 1217 (1996). DOI: 10.1103/PhysRevE.53.1217
- [50] V.B. Sovkov, J. Ma. In: *Proceedings of the 2016 International Conference on Applied Mathematics, Simulation and Modelling*, ed. by A. Dadvand, K.V. Nagaraja, M. Mirzazadeh. *Advances in Computer Science Research (Atlantis Press, Beijing, China, 2016)*, vol. 41, p. 369 (No. 083). DOI: 10.2991/amsm-16.2016.83
- [51] K. Levenberg. *Quarterly of Applied Mathematics*, **2**, 164 (1944).
- [52] D.W. Marquardt. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, **11**, 431 (1963). DOI: 10.1137/0111030
- [53] Дж. Голуб, Ч. Ван Лоун. *Матричные вычисления* (Мир, М., 1999). [G.H. Golub, C.F. van Loan. *Matrix Computations* (The John Hopkins University Press, Baltimore and London, 1996). URL: <https://jhupbooks.press.jhu.edu/content/matrix-computations>]
- [54] C. Lanczos. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, **45**, 255 (1950). DOI: 10.6028/jres.045.026
- [55] R.B. Lehoucq, G.G. Gray, D.-H. Zhang, J.-C. Light. *Computer Physics Communications*, **109**, 15 (1998). DOI: 10.1016/S0010-4655(98)00002-2
- [56] V.B. Sovkov, F. Xie, D. Li, S.S. Lukashov, V.V. Batur, J. Ma, L. Li. *AIP Advances*, **8**, 125322 (2018). DOI: 10.1063/1.5055675
- [57] S.S. Onishchenko, V.B. Sovkov, F. Xie, D. Li, S.S. Lukashov, V.V. Batur, J. Wu, J. Ma, L. Li. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **250**, 107037 (2020). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2020.107037
- [58] A.N. Drozdova, A.V. Stolyarov, M. Tamanis, R. Ferber, P. Crozet, A.J. Ross. *Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics*, **88**(2), 022504 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevA.88.022504
- [59] X. Wang, W. Liu, J. Wu, V.B. Sovkov, J. Ma, P. Li, L. Xiao, S. Jia. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **240**, 106678 (2020). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2019.106678

- [60] P.T. Arndt, V.B. Sovkov, J. Ma, X. Pan, D.S. Beecher, J.Y. Tsai, Y. Guan, A.M. Lyyra, E.H. Ahmed. *Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics*, **99**, 052511 (2019). DOI: 10.1103/PhysRevA.99.052511
- [61] P.T. Arndt, V.B. Sovkov, J. Ma, X. Pan, D.S. Beecher, J.Y. Tsai, Y. Guan, A.M. Lyyra, E.H. Ahmed. *Journal of Chemical Physics*, **149**, 224303 (2018). DOI: 10.1063/1.5058282
- [62] G. Feng, F. Xie, V.B. Sovkov, J. Ma, L. Xiao, S. Jia. *Journal of the Physical Society of Japan*, **87**, 024303 (2018). DOI: 10.7566/JPSJ.87.024303
- [63] V.B. Sovkov, F. Xie, A.M. Lyyra, E.H. Ahmed, J. Ma, S. Jia. *Journal of Chemical Physics*, **147**, 104301 (2017). DOI: 10.1063/1.5001481
- [64] V.B. Sovkov, F. Xie, A.M. Lyyra, E.H. Ahmed, J. Ma, S. Jia. *Journal of Chemical Physics*, **149**, 239901 (2018). DOI: 10.1063/1.5083024
- [65] W. Liu, J. Wu, J. Ma, P. Li, V.B. Sovkov, L. Xiao, S. Jia. *Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics*, **94**, 032518 (2016). DOI: 10.1103/PhysRevA.94.032518
- [66] J. Yang, Y. Guan, W. Zhao, Z. Zhou, X. Han, J. Ma, V.B. Sovkov, V.S. Ivanov, E.H. Ahmed, A.M. Lyyra, X. Dai. *Journal of Chemical Physics*, **144**, 024308 (2016). DOI: 10.1063/1.4939524
- [67] П. Г. Волков, С. И. Коробейников, В. И. Николаев, В. Б. Совков. *Журнал аналитической химии* **71**(5), 494 (2016). [P.G. Volkov, S.I. Korobeinikov, V.I. Nikolaev, V.B. Sovkov. *Journal of Analytical Chemistry*, **71**(5), 471 (2016). DOI: 10.1134/S1061934816030151]
- [68] W. Liu, R. Xu, J. Wu, J. Yang, S.S. Lukashov, V.B. Sovkov, X. Dai, J. Ma, L. Xiao, S. Jia. *Journal of Chemical Physics*, **143**, 124307 (2015). DOI: 10.1063/1.4931646
- [69] V.B. Sovkov, V.S. Ivanov. *Journal of Chemical Physics*, **140**, 134307 (2014). DOI: 10.1063/1.4869981
- [70] V.B. Sovkov, V.S. Ivanov. *Вестник СПбГУ. Сер. 4*, **1**(59), 473 (2014). URL: <http://elibrary.ru/item.asp?id=22697447>
- [71] J. Ma, W. Liu, J. Yang, J. Wu, W. Sun, V.S. Ivanov, A.S. Skublov, V.B. Sovkov, X. Dai, S. Jia. *Journal of Chemical Physics*, **141**, 244310 (2014). DOI: 10.1063/1.4904265
- [72] V.B. Sovkov, D. Li, V.S. Ivanov, A.S. Skublov, F. Xie, Li Li, S. Magnier. *Chemical Physics Letters*, **557**, 66 (2013). DOI: 10.1016/j.cplett.2012.12.030
- [73] В.Б. Совков, В.С. Иванов, К.В. Минаев, М.С. Александров. *Оптика и Спектроскопия*, **114**(2), 185 (2013). [V.B. Sovkov, V.S. Ivanov, K.V. Minaev, M.S. Aleksandrov. *Optics and Spectroscopy*, **114**(2), 167 (2013). DOI: 10.1134/S0030400X13020288]
- [74] Y. Guan, X. Han, J. Yang, Z. Zhou, X. Dai, E.H. Ahmed, A.M. Lyyra, S. Magnier, V.S. Ivanov, A.S. Skublov, V.B. Sovkov. *Journal of Chemical Physics*, **139**, 144303 (2013). DOI: 10.1063/1.4823496
- [75] F. Xie, Li Li, D. Li, V.B. Sovkov, K.V. Minaev, V.S. Ivanov, A.M. Lyyra, S. Magnier. *Journal of Chemical Physics*, **135**, 024303 (2011). DOI: 10.1063/1.3606397
- [76] F. Xie, K.V. Minaev, V.B. Sovkov, V.S. Ivanov, D. Li, Li Li. *Chemical Physics Letters*, **493**, 238 (2010). DOI: 10.1016/j.cplett.2010.05.060
- [77] F. Xie, V.B. Sovkov, A.M. Lyyra, D. Li, S. Ingram, J. Bai, V.S. Ivanov, S. Magnier, Li Li. *Journal of Chemical Physics*, **130**, 051102 (2009). DOI: 10.1063/1.3075580
- [78] Bediha Beser, V.B. Sovkov, J. Bai, E.H. Ahmed, C.C. Tsai, F. Xie, Li Li, V.S. Ivanov, A.M. Lyyra. *Journal of Chemical Physics*, **131**, 094505 (2009). DOI: 10.1063/1.3194290
- [79] F. Xie, D. Li, L. Tyree, L. Li, V.B. Sovkov, V.S. Ivanov, S. Magnier, A.M. Lyyra. *Journal of Chemical Physics*, **128**, 204313 (2008). DOI: 10.1063/1.2920191
- [80] D. Li, F. Xie, Li Li, V.B. Sovkov, V.S. Ivanov, E. Ahmed, A.M. Lyyra, J. Huennekens, S. Magnier. *Journal of Chemical Physics*, **126**, 194314 (2007). DOI: 10.1063/1.2730804
- [81] D. Li, F. Xie, Y. Chu, Li Li, S. Magnier, V.B. Sovkov, V.S. Ivanov. *Chemical Physics*, **332**, 10 (2007). DOI: 10.1016/j.chemphys.2006.11.018
- [82] В.Б. Совков, В.С. Иванов, D. Li, F. Xie, Li Li. *Оптика и Спектроскопия*, **103**(5), 747 (2007). [V.B. Sovkov, V.S. Ivanov, D. Li, F. Xie, Li Li. *Optics and Spectroscopy*, **103**(5), 723 (2007). DOI: 10.1134/S0030400X07110069]
- [83] F. Xie, D. Li, Y. Chu, Li Li, S. Magnier, V.B. Sovkov, V.S. Ivanov. *Journal of Physical Chemistry A*, **110**, 11260 (2006). DOI: 10.1021/jp063266m
- [84] V.B. Sovkov, V.S. Ivanov, Li Li, Z. Chen, S. Magnier. *Journal of Molecular Spectroscopy*, **236**, 35 (2006). DOI: 10.1016/j.jms.2005.12.005
- [85] E. Ahmed, A.M. Lyyra, F. Xie, D. Li, Y. Chu, Li Li, V.S. Ivanov, V.B. Sovkov, S. Magnier. *Journal of Molecular Spectroscopy*, **234**, 41 (2005). DOI: 10.1016/j.jms.2005.08.001
- [86] E. Ahmed, A.M. Lyyra, Li Li, V.S. Ivanov, V.B. Sovkov, S. Magnier. *Journal of Molecular Spectroscopy*, **229**, 122 (2005). DOI: 10.1016/j.jms.2004.08.021
- [87] P. Yi, X. Dai, J. Li, Y. Liu, Li Li, V.B. Sovkov, V.S. Ivanov. *Journal of Molecular Spectroscopy*, **225**, 33 (2004). DOI: 10.1016/j.jms.2004.02.005
- [88] V.S. Ivanov, V.B. Sovkov, Li Li. *Journal of Chemical Physics*, **118**, 8242 (2003). DOI: 10.1063/1.1565107
- [89] V.S. Ivanov, V.B. Sovkov, N. Gallice, Li Li, Y. Liu, A.M. Lyyra, S. Magnier. *Journal of Molecular Spectroscopy*, **209**, 116 (2001). DOI: 10.1006/jmsp.2001.8413
- [90] V.S. Ivanov, V.B. Sovkov, Li Li, A.M. Lyyra, T.-J. Whang, S. Magnier. *Journal of Chemical Physics*, **114**, 6077 (2001). DOI: 10.1063/1.1355979