Numerično reševanje stacionarne in časovno odvisne Schrödingerjeve enačbe

Tomaž Prosen [1], Marko Robnik [2], Gregor Veble[1,2]

[1] Fakulteta za matematiko in fiziko
Univerza v Ljubljani, Slovenija
[2] CAMTP, Univerza v Mariboru, Slovenija

- Predstavitev problema
- Stacionarni problem v biljardih
- Časovno odvisni problem

Predstavitev problema

- Časovno odvisna Schrödingerjeva enačba:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r},t) + V(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$$

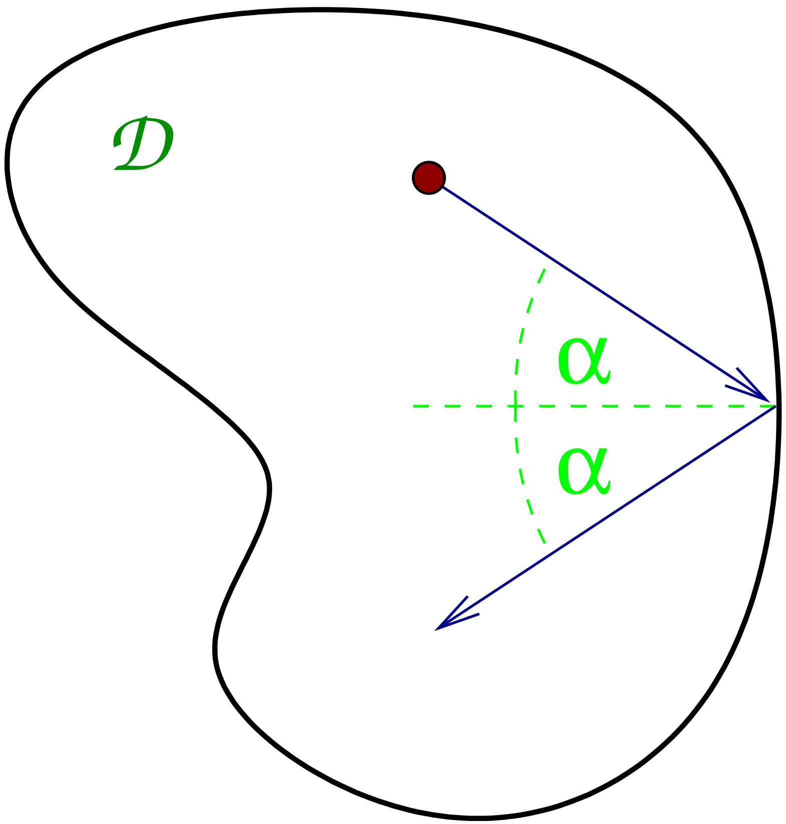
- Stacionarna Schrödingerjeva enačba ($\hat{H} \neq \hat{H}(t)$):

$$\psi(x,t) = \psi(x)\exp(-iEt/\hbar)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$$

Prestavitev problema: biljardi

- Biljardni sistem: prost točkast delec, ki se elastično odbija od sten območja dane oblike:



$$V(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} 0; & \boldsymbol{r} \in \mathcal{D} \\ \infty; & \boldsymbol{r} \notin \mathcal{D} \end{cases}$$

Prestavitev problema: kvantni biljardi

- Stacionarna Schrödingerjeva enačba (Helmholtzova enačba):

$$\Delta_{\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r}) + k^2\psi(\boldsymbol{r}) = 0; \quad k^2 = 2mE/\hbar^2$$

- Časovno odvisna Schrödingerjeva enačba

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r},t)$$

- Dirichletov robni pogoj

$$\psi|_{\partial D} = 0$$

Stacionarni problem v biljardih

- Biljardi so pomembni, saj v njih lahko opazujemo splošne fenomene tako klasičnega kot kvantnega kaosa.
- Klasično zelo enostavni za numerično analizo; kvantno?

Stacionarni problem: običajni pristop

- Iščemo lastna stanja operatorja

$$\hat{H}\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$$

- Zapišemo

$$|\psi\rangle = \sum_j c_j\,|\varphi_j\rangle\,, \quad \langle\varphi_i\,|\varphi_h\rangle = \delta_{ij}$$

- Začetno enačbo z leve pomnožimo s $\langle\varphi_i|$

$$\sum_j H_{ij}c_j = Ec_i, \quad H_{ij} = \langle\varphi_i|\,\hat{H}\,|\varphi_h\rangle$$

Stacionarni problem: običajni pristop nad.

- Za dober izračun zaporednega stanja z indeksom N potrebujemo $\mathcal{O}(N)$ baznih stanj $|\varphi_j\rangle$.
- Diagonalizacija (polne) matrike ima časovno zahtevnost $\mathcal{O}(N^3)$ ter spominsko zahtevnost $\mathcal{O}(N^2)$.

Stacionarni problem: robni pristopi v biljardi

- Klasične trajektorje v biljardih med dvema trkoma so enostavne ravne črte; ni potrebe po integraciji
- Kvantne rešitve enačbe za prost delec pri dani energiji znane (ravni valovi, Besselove funkcije)
- Ali je mogoče najti lastno rešitev Helmholtzove enačbe z linearno kombinacijo rešitev za prost delec ob upoštevanju robnih pogojev?

Stacionarni problem: Hellerjeva metoda

- Zapišimo rešitev kot kombinacijo n ravnih valov (Heller 1984)

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{j=1}^{n} d_j \exp(i\boldsymbol{p}_j\boldsymbol{r}), \quad |\boldsymbol{p}_j| = k$$

- Zadostimo robnemu pogoju v n točkah na robu

$$\psi(\boldsymbol{r}_k) = 0, \quad \boldsymbol{r}_k \in \partial\mathcal{D}$$

- Problem postane nelinearen v valovnem številu k in oblike

$$\sum_{j=1}^{n} A_{ij}(k) d_j = 0, \text{ oz. } \det(A_{ij}(k)) = 0$$

Stacionarni problem: Hellerjeva metoda nad.

- V 2D biljardih velja $n = \mathcal{O}(k) = \mathcal{O}(\sqrt{N})$, spominska zahtevnost je torej $\mathcal{O}(N)$
- Ker je metoda nelinearna, je potrebno iterativno iskati zaporedna lastna stanja s spreminjanjem k; mogoče so izgube stanj
- Metoda deluje v najboljšem primeru le v konveksnih biljardih (Gutkin 2003, pa tudi naše praktične izkušnje)

Metoda z integriranjem po robu

- Greenov stavek pravi, da je mogoče rešitev Helmholtzove enačbe z Dirichletovim robnim pogojem predstaviti z normalnega odvoda na robu območja

$$\psi_k(\mathbf{r}) = -\oint_{\partial D} d\sigma' \; \frac{\partial \psi_k}{\partial \mathbf{n}'}(\mathbf{r}') \; G(k;\mathbf{r},\mathbf{r}'),$$

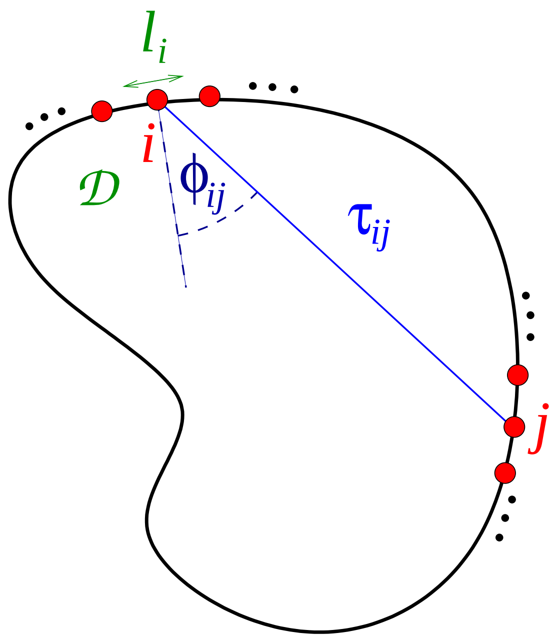
$$(\Delta_{\mathbf{r}} + k^2) G(k;\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}').$$

- Alternativna reprezentacija (dobimo z odvajanjem v normalni smeri po r)

$$\frac{\partial \psi_k}{\partial \mathbf{n}}(r) = -2 \oint_{\partial D} d\sigma' \; \frac{\partial \psi_k}{\partial \mathbf{n}'}(\mathbf{r}') \frac{\partial G(k;\mathbf{r},\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}}$$

Metoda z integr. po robu: implementacija

Rob biljarda diskretiziramo v $n = \mathcal{O}(k)$ točkah in integral spremenimo v vsoto



$$[\mathbf{A}(k)\boldsymbol{u}]_i = \sum_j A_{ij}(k) u_j = 0$$

$$A_{ij}(k) = l_i \left[\delta_{ij} \left(1 - \frac{l_i \kappa_i}{2\pi} \right) + \frac{ikl_j}{2} H_1^{(1)}\left(k\tau_{ij}\right) \cos\phi_{ij} \right]$$

Ponovno nelinearen problem v parametru k, z vsemi težavami tega pristopa

Metoda z integr. po robu: izboljšave

- Namesto iskanja ničel $\det(A_{ij})$ razstavimo matriko na singularne vrednosti in singularne vektorje (Bäcker 2003)
- Hellerjevo metodo z razstavitvijo na ravne valove je moč prepisati tako, da lahko v enem zamahu najdemo več nivojev v okolici izbrane referenčne vrednosti k_0 (skalirna metoda, Vergini in Saraceno 1995)
- Poskusimo posplošiti skalirni pristop na metodo z integriranjem po robu

Posplošena skalirna metoda

- Razvijmo:

$$\left[\mathbf{A}(k_0) + \delta k \mathbf{A}'(k_0) + \frac{(\delta k)^2}{2}\mathbf{A}''(k_0) + \ldots\right] \boldsymbol{u} = 0,$$

- Z upoštevanjem prvih dveh členov dobimo posplošen lastni problem

$$\mathbf{A}(k_0)\boldsymbol{u}_0 = (-\delta k_0)\, \mathbf{A}'(k_0)\boldsymbol{u}_0$$

- Za izračun popravkov vpeljimo levi lastni vektor

$$[\mathbf{A}(k_0)]^\dagger \boldsymbol{v}_0 = (-\delta k_0) \left[\mathbf{A}'(k_0)\right]^\dagger \boldsymbol{v}_0$$

Posplošena skalirna metoda nad.

- Premik valovnega števila ter lastni vektor razvijmo po majhnem parametru odmika od referenčne vrednosti

$$\delta k = \delta k_0 + \delta k_1 + \ldots, \;\; \boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_0 + \boldsymbol{u}_1 + \ldots$$

- Osnovno enačbo z leve pomnožimo z $v_0^\dagger$ in iz popravkov drugega reda dobimo

$$\delta k_1 = -\frac{(\delta k_0)^2}{2} \frac{\boldsymbol{v}_0{}^\dagger \mathbf{A}''(k_0)\boldsymbol{u}_0}{\boldsymbol{v}_0{}^\dagger \mathbf{A}'(k_0)\boldsymbol{u}_0}$$

Posplošena skalirna metoda nad. 2

Težav še ni konec...

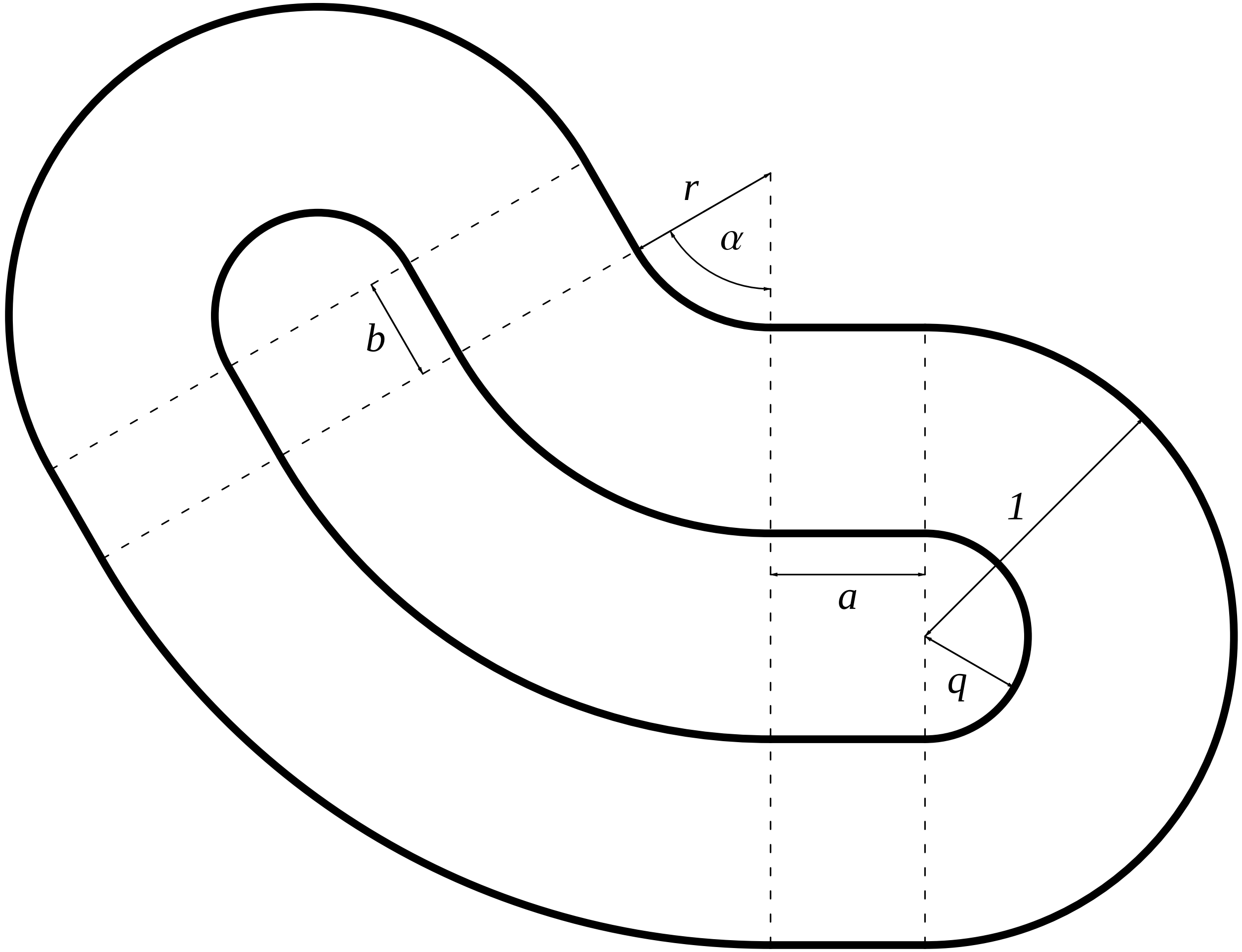
- Nepričakovane rešitve v sistemih z luknjami; izkaže se, da sistem enačb najde tudi rešitve zunanjega problema z Neumannovimi robnimi pogoji
  - Rešimo enak problem samo za luknje sistema in zavržemo ustrezne rešitve v originalnem problemu
  - Pazljivo glede mogočih resonanc zunaj sistema!

- Izbira kompleksne Greenove funkcije je še kako pomembna

Monza biljard

Biljardi z enosmernim transportom (Horvat, Prosen 2004);

Monza biljard ($\alpha = 1$,$q = 1/3$, $r = 1/3$, $a = 1/2$, $b = 1/3$):

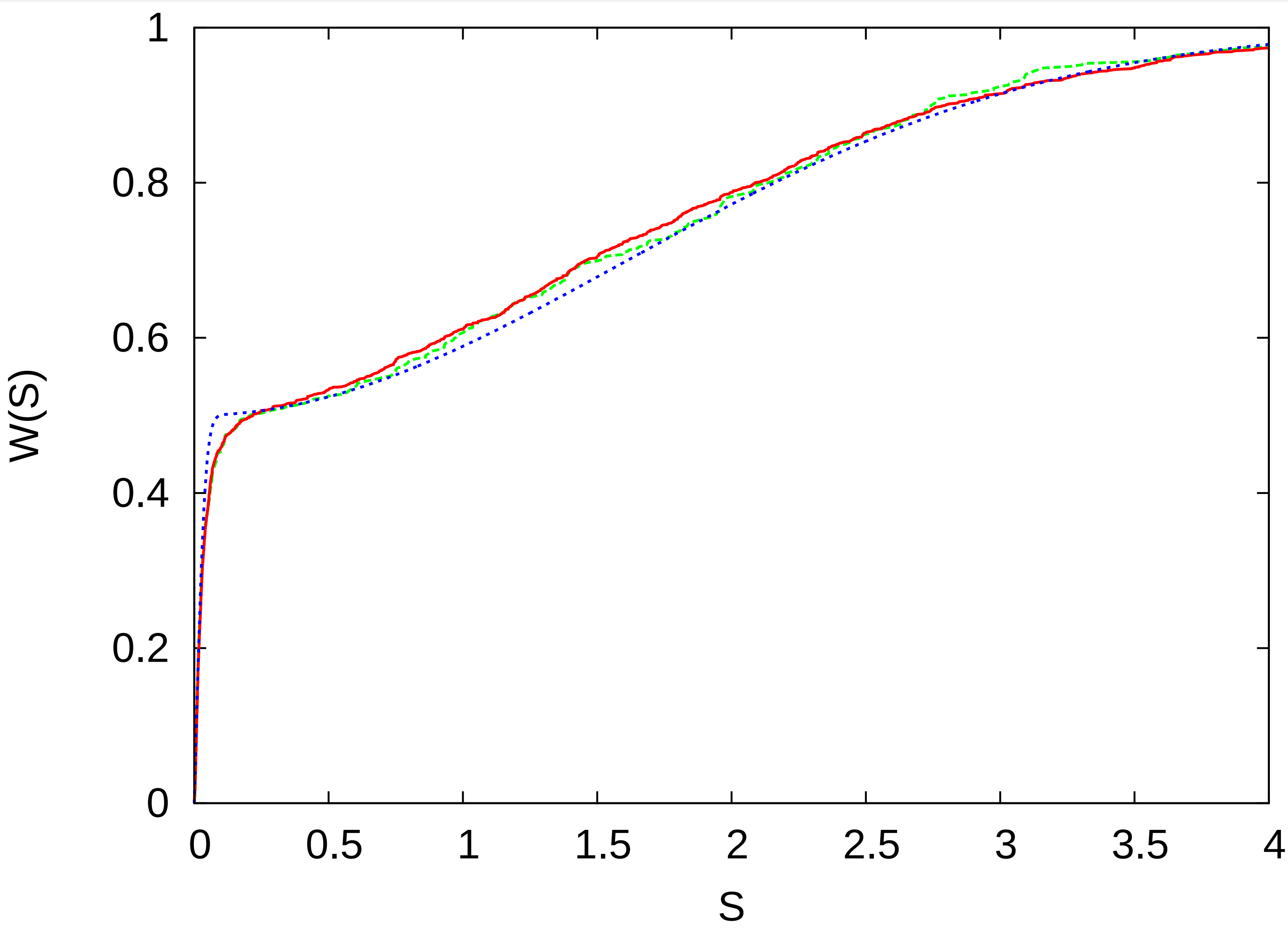


Lastnosti Monza biljarda

- Dve neodvisni kaotični komponenti, ločeni z družino prečnih odbijajočih se orbit (Bunimovich)

- Sistem ima simetrijo na obrat časa; pričakujemo veliko skoraj degeneriranih nivojev in posledično kaotični Schnirelmannov vrh v porazdelitvi razmikov med sosednjimi nivoji

Spektralna statistika



N=1773, N_v=500

Časovno odvisni problem

Schrödingerjeva enačba

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r},t) + V(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$$

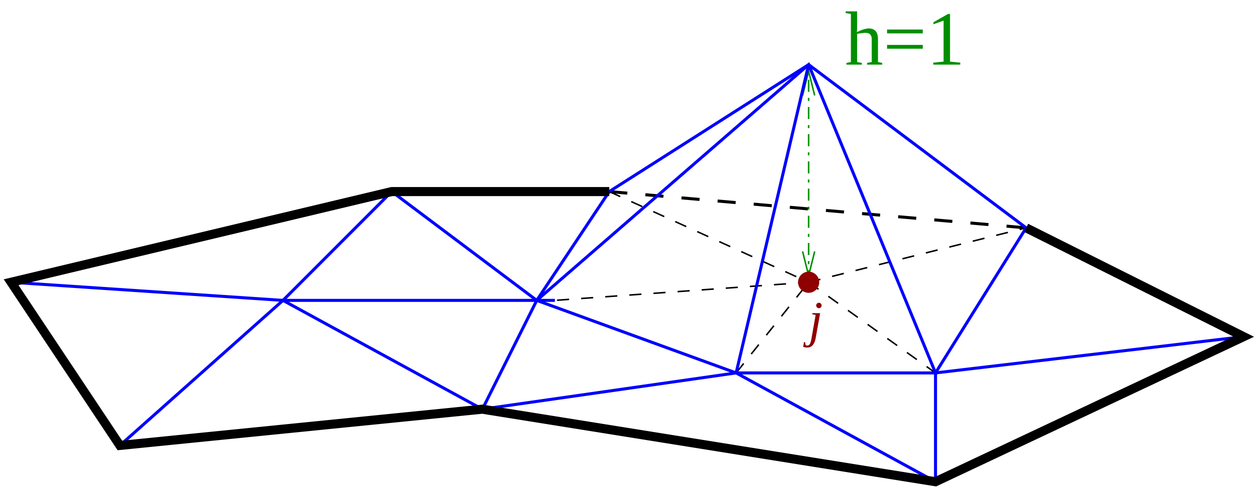
Unitarna evolucija

$$\psi(\boldsymbol{r},t_2) = \hat{U}_{t_2,t_1}\psi(\boldsymbol{r},t_1)$$

- Naivni diferenčni pristopi v času povečujejo (eksplicitna shema) ali zmanjšujejo (implicitna shema) normo valovne funkcije

Metoda končnih elementov

Za diskretizacijo Laplaceovega operatorja v poljubnih geometrijah je prikladna metoda končnih elementov, kjer v 2D izbrano območje razdelimo na trikotnike in vpeljemo piramidne bazne funkcije ϕ_j:



$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \sum_j f_j(t)\phi_j(\boldsymbol{r})$$

Variacijski princip

Po Galerkinu predstavimo operatorje v bazi ϕ_j kot redke matrike

$$T_{ij} = -\int d^2\boldsymbol{r}\ \phi_i(\boldsymbol{r})\ \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\boldsymbol{r}}\phi_j(\boldsymbol{r})$$

$$V_{ij}(t) = \int d^2\boldsymbol{r}\ \phi_i(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r},t)\phi_j(\boldsymbol{r})$$

$$J_{ij} = \int d^2\boldsymbol{r}\ \phi_i(\boldsymbol{r})\phi_j(\boldsymbol{r})$$

Tako dobimo

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{J}\boldsymbol{f} = \left(\mathbf{T} + \mathbf{V}(t)\right)\boldsymbol{f} = \mathbf{H}(t)\boldsymbol{f}$$

Reševanje časovno odvisnega problema

- Propagacija v času zahteva najmanj obrat matrike $\mathbf{J}$
- Matrike povezujejo najbližje sosede; $\mathbf{J}$ nadomestimo z diagonalno aproksimacijo $\tilde{\mathbf{J}}$ (povezava s metodo končnih volumnov)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\mathbf{J}}\boldsymbol{f} = \mathbf{H}(t)\boldsymbol{f}, \quad \tilde{J}_{ii} = \sum_j J_{ij}$$

$$\boldsymbol{g} = \tilde{\mathbf{J}}^{1/2}\boldsymbol{f}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{g} = \tilde{\mathbf{J}}^{-1/2}\mathbf{H}(t)\tilde{\mathbf{J}}^{-1/2}\boldsymbol{g} = \tilde{\mathbf{K}}(t)\boldsymbol{g}$$

Reševanje časovno odvisnega problema nad.

- Propagacijo zapišimo kot

$$\boldsymbol{g}(t+\Delta t) \approx \exp(i\mathbf{K}(t+\Delta t/2)\Delta t/\hbar)\ \boldsymbol{g}(t)$$

  Izraz točen v času, če $\mathbf{K} \neq \mathbf{K}(t)$.

- Eksponent zapišemo kot konvergentno vrsto

$$\exp(i\mathbf{K}\Delta t/\hbar) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(i\mathbf{K}\Delta t)^j}{j!\hbar^j}$$

- Največja lastna vrednost $\lambda_{K\max} \approx \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2}$ Zato

$$\Delta t \approx \frac{m\ \Delta x^2 j_{\max}}{\hbar}$$

Časovna slika: film

- Tipični razmik $\Delta x = 0.02$
- Število množenj s $\mathbf{K}$ na iteracijo $j_{\max} = 10$
- $\Delta t = 10^{-5}$
- $\hbar = 1, m = 1/2$

Časovna slika: tok