

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2018.02.019

# 虚时演化-劈裂算符方法在谐振子中的应用研究

陈艳<sup>1,2</sup>, 张科智<sup>1,2</sup>, 葛素红<sup>1,2</sup>, 向根祥<sup>1</sup>, 何永林<sup>1,2</sup>, 王彬<sup>3</sup>

(1. 河西学院物理与机电工程学院, 张掖 734000; 2. 河西学院理论物理研究所, 张掖 734000;

3. 太原理工大学物理与光电工程学院, 太原 030024)

**摘要:** 发展了一套以非微扰的方式求解含时薛定谔方程的理论方法(虚时演化-劈裂算符法), 该方法分别选用动量表象和坐标表象作为含时波函数演化的两个表象. 在坐标表象下波函数的坐标部分使用库仑函数离散变量来离散, 动量表象下时间波函数展开在对应的格点上. 以谐振子为例, 进行了数值计算, 发现在谐振势中放置两个电子, 它们之间存在库仑相互作用. 通过改变谐振势的强度, 可以探索双电子基态波函数的定性变化. 当谐振势较弱的时候, 两个电子的波函数没有交叠, 可作为 Wigner 晶格出现的证据. 随着谐振势的增强, 电子波函数开始发生重叠, 类似于分子形成过程.

**关键词:** 薛定谔方程; 谐振势; 虚时演化-劈裂算符法; 库仑奇点

**中图分类号:** O481.1      **文献标识码:** A      **文章编号:** 0490-6756(2018)02-0329-05

## Application study of virtual time evolution-split operator method to harmonic oscillator

CHEN Yan<sup>1,2</sup>, ZHANG Ke-Zhi<sup>1,2</sup>, GE Su-Hong<sup>1,2</sup>,  
XIANG Gen-Xiang<sup>1</sup>, HE Yong-Lin<sup>1,2</sup>, WANG Bin<sup>3</sup>

(1. Department of Physics and Mechanical Engineering, Hexi University, Zhangye 734000, China;

2. Institute of Theoretical Physical, Hexi University, Zhangye 734000, China;

3. College of Physics and Optoelectronic Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China)

**Abstract:** We present a virtual time evolution-split operator method for solving the two-dimensional time-dependent Schrödinger equation. In this method, the Hamiltonian is accessed by employing the two representations of the wave function. One is a coordinate representation, in which the coordinate dependence of the wave function is discretized using a discrete variable constructed from the Coulomb wave function. Another is the momentum representation, the time function is expanded in the corresponding lattice. As an example, the present method is applied to the harmonic oscillator. It is found that there exists Coulomb interaction when two electrons are stored in the harmonic oscillator potential well. We explore the qualitative change of two electrons ground state wave function by altering the strength of the harmonic oscillator potential. When harmonic oscillator potential is weak, the wave functions are not overlapped, which can be used as an evidence for presence of Wigner lattice. With the increase of harmonic oscillator potential, the wave functions begin to overlap, which is similar to the molecules formation.

收稿日期: 2017-07-12

基金项目: 国家自然科学基金(11364016, 11464010); 甘肃省陇原青年创新人才扶持计划(2050205-2); 甘肃省自然科学基金(1606RJZG048); 甘肃省高等学校自然科学基金(2016A-075)

作者简介: 陈艳(1980-), 女, 甘肃嘉峪关人, 博士, 主要从事冷原子物理的研究工作. E-mail: chy\_jp@163.com

**Keywords:** Schrödinger equation; Virtual time evolution-split operator method; Harmonic oscillator potential; Coulomb singularity

## 1 引言

作为物理学中最基本的模型之一,谐振子模型在物理学中的很多不同领域有着非常广泛的应用.因此不同类型谐振子的研究是个非常具有吸引力的领域<sup>[1-6]</sup>.随着现代技术的发展,人们对含时系统的研究越来越深入,其目的是最终能够实现对这些系统的控制.含时谐振子系统广泛应用于物理学中许多不同的领域<sup>[7-11]</sup>,如等离子体物理、量子光学、分子物理、量子场论、量子信息和量子化学等.面对新的谐振子物理现象,传统的理论方法已不能给出令人满意的定性的结果,这就需要在理论上谋求新的方案来处理含时谐振子问题.例如,演化算符法,含时密度理论,直接求解含时薛定谔方程<sup>[12-13]</sup>等理论方法在该领域得到了广泛应用.

通过直接求解含时薛定谔方程的方法,人们解释和预测了许多奇特的物理问题.但是该方法做计算时计算量很大,为了考虑库仑势长程作用的影响,需要在很大的坐标空间设置网格点,而且由于库仑奇点的存在,网格点的分布须足够密,这样计算量就会非常大,而且计算精度也会大大降低.为此,如何提高求解含时薛定谔方程的效率和精度,是当前含时谐振子物理理论研究的重要方向之一.

2002年,由 Dunseath 等人<sup>[14]</sup>提出的库仑波函数离散变量表象方法,不但继承了一般离散变量表象的优点,简化了哈密顿矩阵元的计算,而且处理了库仑奇点的问题.在此基础上,本文发展了一套以非微扰的方式求解二维含时薛定谔方程的虚实演化-劈裂算符法.通过定义虚时间,选用劈裂算符作为时间的演化算子,分别选用动量表象和坐标表象作为含时波函数演化的两个表象.在坐标表象下,波函数的坐标部分使用库仑函数离散变量来离散,时间波函数展开在对应的格点上.

为了检验此方法在极限条件下的数值精度,以谐振子为例,进行了数值计算.在谐振势中放置两个电子,发现它们之间存在库仑相互作用,电子基态谐振子的能量在不同的谐振势作用下能快速趋于稳定.通过改变谐振势的强度,可以探索双电子基态波函数的定性变化.当谐振势较弱的时候,

两个电子的波函数没有交叠,可作为 Wigner 晶格出现的证据.随着谐振势的增强,电子波函数开始发生重叠,类似于分子形成过程.

## 2 理论方法

### 2.1 虚时演化

假设系统的哈密顿量为  $H$ ,  $\epsilon_n$  和  $|\psi_n\rangle$  分别是它的第  $n$  个本征能量和本征态.

$$H|\psi_n\rangle = \epsilon_n|\psi_n\rangle \quad (1)$$

对 Schrödinger 方程  $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$  初次积分得

$$\psi(t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right)\psi(t) \quad (2)$$

设  $t$  时刻粒子状态,

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t)\psi_n \quad (3)$$

根据  $e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots$  对式(3)进行展开,

同时利用本征公式(1),可得

$$\psi(t + \Delta t) = \sum_n c_n(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n\Delta t\right)\psi_n \quad (4)$$

定义虚时间  $\tau = i\Delta t$ , 波函数的演化变成

$$\psi(\tau + \Delta\tau) = \sum_n c_n(\tau)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\epsilon_n\Delta\tau\right)\psi_n \quad (5)$$

记  $c_n(\tau + \Delta\tau) = c_n(\tau)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\epsilon_n\Delta\tau\right)$ . 由于  $\epsilon_0 < \epsilon_1 < \epsilon_2 < \dots$ , 不难想象,随着时间的演化,基态的成分变得越来越大(因为基态前面的系数每次乘的指数因子总是最小的).当时间足够长以后,就可以把所得的波函数当成基态波函数了.

为此,我们总结虚时演化求基态波函数的基本方法为:(a)任意给定一初始波函数  $\psi(0)$ ; (b)进行虚时演化  $\psi(\Delta t) = \exp\left(-\frac{1}{\hbar}H\Delta t\right)\psi(0)$ ; (c)对  $\psi(\Delta t)$  进行归一化后作为初始状态重复(b)步骤,直到能量减小到趋于稳定为止.

在实际计算过程中,(b)步骤对波函数进行量子演化时往往比较复杂,常需要采用一些特殊技巧——如劈裂算符,以提高计算精度.

### 2.2 劈裂算符

在量子力学中,坐标和动量是相互不对易的.因此,在一般情况下,  $\exp(-H\Delta t) \neq \exp(-T\Delta t)\exp(-V\Delta t)$ . 但当  $\Delta t$  较小的时候,该等式近

似成立, 并且精确到  $\Delta t$  的二阶小量. 因为

$$\begin{aligned} \exp(-H\Delta t) &= 1 - H\Delta t + \frac{1}{2!}H^2\Delta t^2 - \\ &\frac{1}{3!}H^3\Delta t^3 + \dots = 1 - (T+V)\Delta t + \\ &\frac{1}{2!}(T^2 + V^2 + TV + VT)\Delta t^2 + \dots \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \exp(-T\Delta t)\exp(-V\Delta t) &= \\ [1 - T\Delta t + \frac{1}{2!}(T^2\Delta t^2) + \dots][1 - V\Delta t + \\ &\frac{1}{2!}(V^2\Delta t^2) + \dots] = 1 - (T+V)\Delta t + \\ &\frac{1}{2!}(T^2 + V^2 + 2TV)\Delta t^2 + \dots \end{aligned} \quad (7)$$

对比(6)、(7)两式, 得

$$\begin{aligned} \exp(-H\Delta t) &= \\ \exp(-T\Delta t)\exp(-V\Delta t) &+ o(\Delta t^2) \end{aligned} \quad (8)$$

如果把动能项一分为二, 有

$$\begin{aligned} \exp(-T/2\Delta t)\exp(-V\Delta t)\exp(-T/2\Delta t) &= \\ [1 - \frac{T}{2}\Delta t + \frac{1}{2!}(\frac{T^2}{4}\Delta t^2) + \dots][1 - V\Delta t + \\ &\frac{1}{2!}(V^2\Delta t^2) + \dots][1 - \frac{T}{2}\Delta t + \\ &\frac{1}{2!}(\frac{T^2}{4}\Delta t^2) + \dots] = 1 - (T+V)\Delta t + \\ &\frac{1}{2!}(T^2 + V^2 + TV + VT)\Delta t^2 + \dots \end{aligned} \quad (9)$$

对比(6)、(9) 两式, 得

$$\begin{aligned} \exp(-H\Delta t) &= \\ \exp(-T/2\Delta t)\exp(-V\Delta t)\exp(-T/2\Delta t) &+ o(\Delta t^3) \end{aligned} \quad (10)$$

在数值计算中, 公式(10)比近似公式(8)提高了若干个数量级(例如取  $\Delta t = 0.0001$ , 可以提高 4 个数量级), 因此, 在数值计算时采用(10)式进行数值计算. 同时, 为了提高计算精度, 应尽可能减小时间步长, 特别是当  $V$  中含有库仑排斥势的时候更应该如此.

### 2.3 快速傅立叶变换

公式(10)在提高计算精度的同时加大了计算难度. 因为算符在指数因子上, 采用级数展开的方式计算, 不仅精度降低, 还非常麻烦. 因此人们常引进傅立叶变换(FFT)方法. 首先, 把坐标空间的波函数通过 FFT 变成动量空间的波函数, 用算符  $\exp(-T/2\Delta t)$  作用后变回坐标空间; 然后, 用算符  $\exp(-V\Delta t)$  作用变到动量空间, 用算符  $\exp(-T/2\Delta t)$  作用; 最后, 变回坐标空间, 即为

一次完整演化后的波函数. 由坐标空间变回动量空间的 FFT 示意图如图 1 所示.

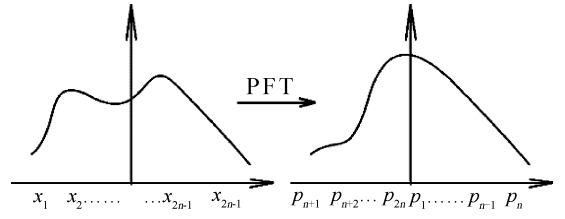


图 1 由坐标空间变化到动量空间的 FFT 示意图  
Fig. 1 The FFT figure transiting coordinate space to momentum space

因周期边界效应, 做完 FFT 后应该把动量空间波函数的后半部分平移到负半空间, 同时相邻两点间距离  $\Delta P = 2\pi/(N\Delta x)$ , 在这里  $N$  是波函数格点数.

### 3 理论模型

谐振势中的多电子系统由如下哈密顿量描述:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{m\omega^2 x_1^2}{2} + \\ &\frac{m\omega^2 x_2^2}{2} + \frac{e^2}{\epsilon_b |x_1 - x_2|} \end{aligned} \quad (11)$$

其中,  $m$  是电子的质量,  $\epsilon_b$  是系统所处环境的介电常数. 选取无量纲单位:

$$x_0 = \sqrt{\frac{3e^2}{\epsilon_b m \omega^2}}, E_0 = \frac{e^2}{\epsilon_b x_0} \quad (12)$$

(12)式作为长度和能量的标度, 对哈密顿(11)进行无量纲化, 得

$$\hat{H} = -\frac{\lambda^2}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) + x_1^2 + x_2^2 + \frac{1}{|x_1 - x_2|} \quad (13)$$

其中,

$$\lambda = \frac{\sqrt{2}\hbar}{m\omega x_0} = \frac{\sqrt{2}\hbar}{m^{\frac{1}{3}} \left( \frac{\epsilon_b}{2e^2} \right)^{\frac{2}{3}} \omega^{\frac{1}{3}}} = 10^{-6} \omega^{\frac{1}{3}} \quad (14)$$

对全同粒子的处理, 我们知道电子是费米子, 而多电子的波函数满足反对称性, 取

$$\Psi(x_1, x_2) = A[\psi(x_1, x_2) - \psi(x_2, x_1)] \quad (15)$$

这里  $A$  是归一化常数. 在求解(13)式哈密顿量所对应的含时薛定谔方程时, 先给定  $\psi(x_1, x_2)$ , 利用虚时演化, 得到新的  $\psi(x_1, x_2)$ , 取  $A[\psi(x_1, x_2) - \psi(x_2, x_1)]$ (排除对称部分)作为新的初始状态, 利用二阶劈裂算符法(即方程(10))继续演化, 直到能量值接近稳定时停止.

## 4 结果与讨论

电子是费米子, 满足泡利不相容原理, 数值计算过程中必须注意波函数的交换反对称性. 电子之间同时具有库仑相互作用, 这是一种长程强关联相互作用势, 并且当粒子重叠时候会发散. 当  $x_1 = x_2$  时, 库仑势发散. 为了克服这一弱点, 同时保留库仑势的强关联性, 在数值计算过程中取等效势为:

$$\frac{1}{|x_1 - x_2|} = \begin{cases} \frac{1}{|x_1 - x_2|} & (x_1 \neq x_2) \\ \frac{10}{\Delta x} & (x_1 = x_2) \end{cases} \quad (16)$$

其中,  $\Delta x$  是位置空间中的网格长度.

图 2 给出了不同谐振势作用下, 双电子基态谐振子的能量随时间的演化. 可以看出, 总体上能量随时间先指数衰减后趋于稳定. 但随着谐振势的增强, 由图 2(a)、(b) 可以看到,  $\lambda=0.01$  变化到  $\lambda=1.00$  时体系的能量增大, 趋于稳定的临界值也增大. 整体上系统的能量在较短的时间内可以趋于稳定.

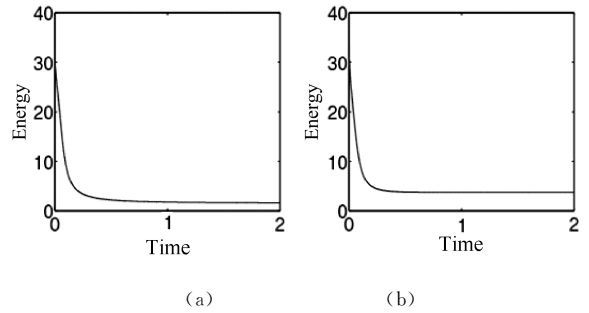


图 2 数值计算得到能量随时间的演化: (a)  $\lambda=0.01$ ; (b)  $\lambda=1.00$

Fig. 2 Energy versus time for different interaction parameters: (a)  $\lambda=0.01$ ; (b)  $\lambda=1.00$

对比图 3 所示的第 1 行和第 2 行, 可以看出, 在谐振势中放置两个电子, 它们之间存在库仑相互作用. 通过改变谐振势的强度, 我们可以探索双电子基态波函数的定性变化. 如图 3(a)、(b)、(d)、(e) 所示, 不管是对称波函数还是不对称波函数, 当谐振势较弱的时候, 两个电子的波函数没有交叠, 这可作为 Wigner 晶格出现的证据. 随着谐振势的增强, 如图 3(c)、(f) 所示电子波函数开始发生重叠, 这类似于分子形成过程.

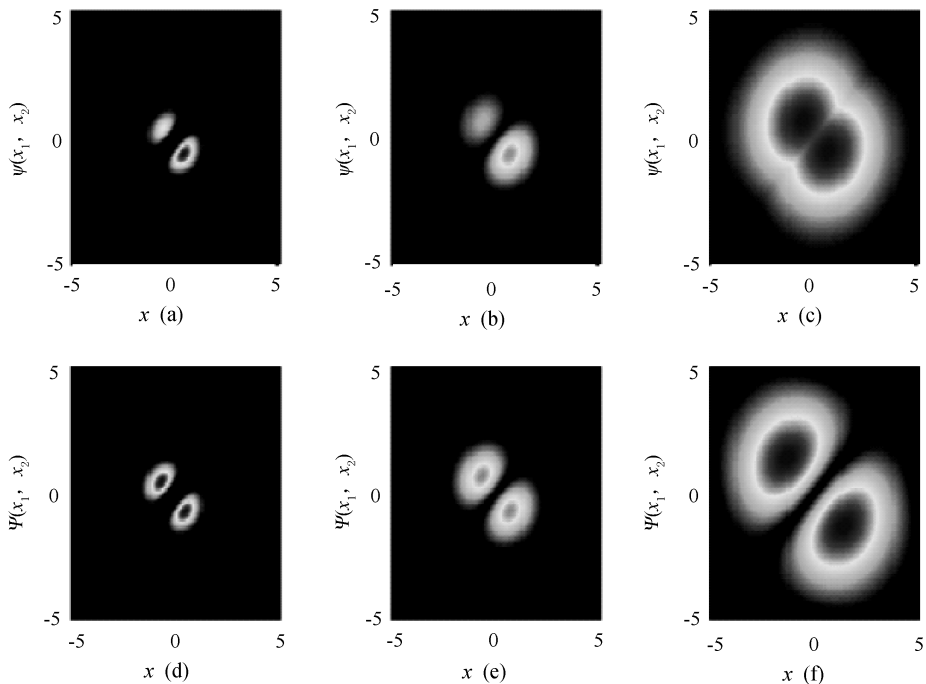


图 3 不对称波函数  $\phi(x_1, x_2)$  和对称波函数  $\Psi(x_1, x_2)$  的空间演化: (a), (c)  $\lambda=0.01$ ; (b), (e)  $\lambda=1.00$ ; (c), (f)  $\lambda=2.80$

Fig. 3 Spatial evolution of symmetric wave function  $\Psi(x_1, x_2)$  and asymmetric wave function  $\phi(x_1, x_2)$ : (a), (c)  $\lambda=0.01$ ; (b), (e)  $\lambda=1.00$ ; (c), (f)  $\lambda=2.80$

## 5 结 论

本文发展了求解非线性薛定谔方程的虚实演化-劈裂算符方法,该方法有较好的计算效率,并且成功地解决了含有库仑奇点的问题,为求解多电子的非线性薛定谔方程奠定了基础.另外,我们以谐振势中的多电子系统为例做了相应的数值计算.结果表明,双电子基态谐振子的能量在不同的谐振势作用下能快速趋于稳定.此外,通过改变谐振势的强度,探索双电子基态波函数的定性变化.当谐振势较弱的时候,两个电子的波函数没有交叠,这可作为 Wigner 晶格出现的证据.随着谐振势的增强,电子波函数开始发生重叠,类似于分子形成过程.

### 参考文献:

- [1] Dodonov V V, Man'ko V I. Coherent states and the resonance of a quantum damped oscillator [J]. *Phys Rev A*, 1979, 20: 550.
- [2] Sebaue A M. Time-dependent harmonic oscillator with variable mass under the action of a driving force [J]. *Phys Rev A*, 1986, 34: 4598.
- [3] Sebaue A M, Colegrave R K. Harmonic oscillator with strongly pulsating mass under the action of a driving force [J]. *Phys Rev A*, 1989, 32: 1958.
- [4] Gerry C C. Dynamics of  $SU(1,1)$  coherent states [J]. *Phys Rev A*, 1985, 31: 2721.
- [5] Gerry C C, Vrscaj E R. Dynamics of pulsed  $SU(1,1)$  coherent states [J]. *Phys Rev A*, 1989, 39: 5717.
- [6] Yeon K H, Um C I, George T F, *et al.* Coherent states for the damped harmonic oscillator [J]. *Phys Rev A*, 1987, 36: 5287.
- [7] Tanas R, Miranowicz A, Kielich S. Squeezing and its graphical representations in the anharmonic oscillator model [J]. *Phys Rev A*, 1991, 43: 4014.
- [8] Dattoli G, Richetta M, Torre A. Operator disentanglement [J]. *Phys Rev A*, 1988, 37: 2007.
- [9] Agarwal G S, Kumar S A. Exact quantum-statistical dynamics of an oscillator with time-dependent frequency and generation of non-classical states [J]. *Phys Rev Lett*, 1991, 67: 3665.
- [10] Graham R. Squeezing and frequency changes in harmonic oscillations [J]. *J Mod Opt*, 1987, 34: 873.
- [11] Moya-Cessa H, Guasti M F. Time dependent quantum harmonic oscillator subject to a sudden change of mass: continuous solution [J]. *Rev Mex Fis*, 2007, 53: 42.
- [12] Lo C F. Time evolution of a charged oscillator with a time-dependent mass and frequency in a time-dependent electromagnetic field [J]. *Phys Rev A*, 1992, 45: 5262.
- [13] Kulander K C. Multiphoton ionization of hydrogen: a time-dependent theory [J]. *Phys Rev A*, 1987, 35: 445.
- [14] Dunseath K M, Launary J M, Terao-Dunseath M, *et al.* Schwartz interpolation for problems involving the Coulomb potential [J]. *J Phys B: At Mol Opt*, 2002, 35: 3539.