

Использование метода перевала в нестационарных задачах квантовой механики

Махно А А

Воронежский государственный университет

Руководитель Флегель А В

- 1 Постановка задачи
- 2 Метод перевала
- 3 Аналитическое ршение
- 4 Численное решение
- 5 Сравнение результатов

В квантовой механике одноэлектронная математическая модель атома, подверженного воздействию лазерного импульса, описывается нестационарным уравнением Шредингера для электронной волновой функции

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - U(r) - V(r, t) \right] \Psi(r, t) = 0$$

Волновая функция при $r \rightarrow \infty$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{2\pi\hbar^2}{mk} \int_{-\infty}^t e^{-i\epsilon t'/\hbar} G(\mathbf{r}, t; 0, t') f(t') dt', \quad (1)$$

где $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ - функция Грина, имеющая вид

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -\theta(t - t') \frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2\pi i \hbar (t - t')} \right]^{3/2} e^{iS(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')/\hbar},$$

Граничное условие при $r \rightarrow 0$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \sim \left(B(\epsilon) + \frac{1}{r} \right) f(t) e^{-i\epsilon t/\hbar} \quad (2)$$

Постановка задачи

Переходя в атомную систему единиц ($|e| = m_e = \hbar = 1$), и сшивая уравнения (1) и (2), получаем систему:

$$\begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^0 [B(\epsilon + n\omega) - i(2(\epsilon + n\omega))^{1/2}] f_n e^{-in\omega t} = \\ = \sum_{m=-\infty}^0 \mathcal{M}(\epsilon + m\omega, t) f_m e^{im\omega t}, \end{aligned} \quad (3)$$

где для расчета образа фурье функции f (f_i), потребуется вычислять матричный элемент

$$\mathcal{M}(\epsilon, t) = \sqrt{\frac{1}{2\pi i}} \int_0^\infty \frac{e^{i\epsilon\tau}}{\tau^{3/2}} \left[e^{iS(t, t-\tau)} - 1 \right]. \quad (4)$$

Метод перевала

Метод перевала применяется для оценки при больших значениях параметра λ интегралов вида

$$I(\lambda) = \int_a^b \phi(t) e^{\lambda f(t)} dt$$

Преобразуя их к виду

$$I(\lambda) \sim e^{\lambda f(z_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{|f''(z_0)|}} \phi(z_0) e^{i\theta} \frac{1}{\sqrt{\lambda}},$$

где z_0 - корни уравнения $f'(t) = 0$.

В интеграле $M(\epsilon, t)$ роль большого параметра λ играет величина:

$$\lambda = \frac{1}{2\mathcal{T}} \int_{-\mathcal{T}/2}^{\mathcal{T}/2} A^2(\tau) d\tau. \quad (5)$$

Итоговая формула, получанная методом перевала

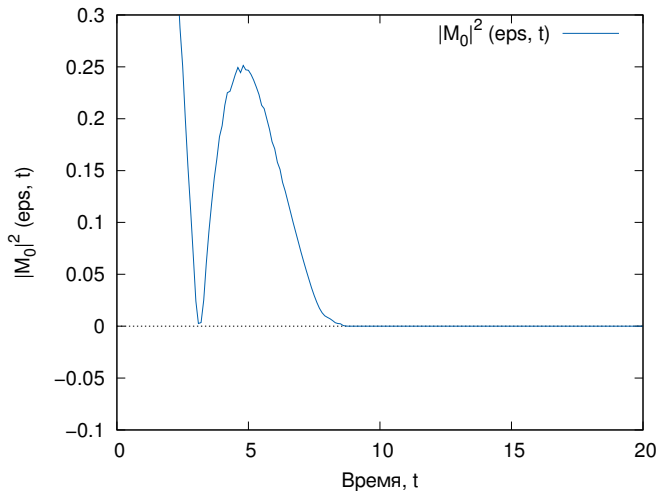
$$\mathcal{M}(\epsilon, t) \simeq \sum_{t_0} \frac{e^{i\tilde{S}(t, t_0)}}{\sqrt{D}(t - t_0)^{3/2}}, \quad (6)$$

где $\tilde{S} = \epsilon(t - t_0) + S(t, t_0)$,

$$D = \alpha(t_0, t, t_0) \left[F(t_0) - \frac{1}{(t - t_0)^2} \int_{t_0}^t A(\tau) d\tau + \frac{A(t_0)}{t - t_0} \right]$$

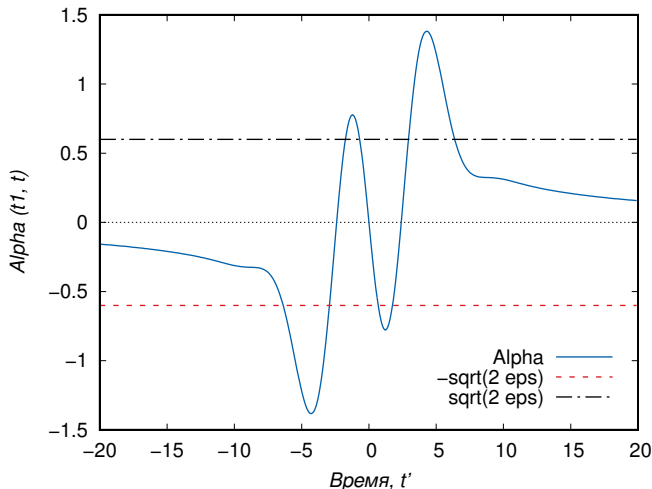
и t_0 - корни уравнения $\alpha^2(t_0, t, t_0) = 2\epsilon$.

Рассмотрим вклад точки $t = t'$ в интеграл \mathcal{M}



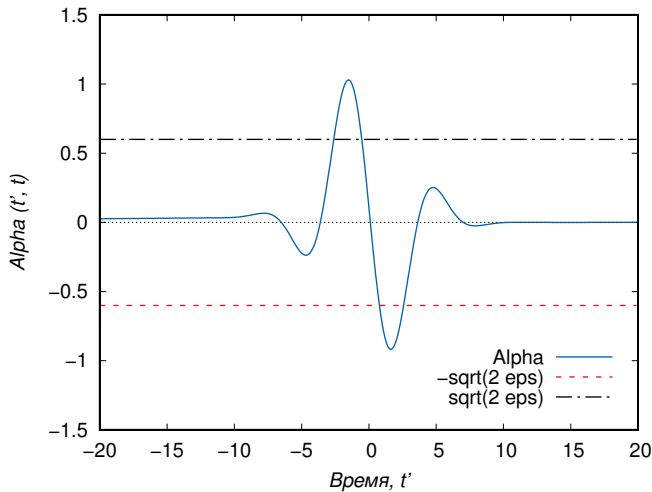
Аналитическое решение

Решим уравнение $\alpha^2(t_0, t, t_0) = 2\epsilon$ для $\epsilon \geq 0$. На рисунке изображена функция $\alpha(t', t, t')$, $t = 0$.



Аналитическое решение

Аналогично, $\alpha(t', t, t')$ для случая $t = 20$.



Для получения точного численного решения использовалась библиотека GNU GSL, а также FFTW. Сравнивая вид преобразования Фурье с видом искомого интеграла \mathcal{M} , получаем ($t = \text{const}$), что если

$$f(\tau) = \frac{1}{\tau^{3/2}}(e^{iS(t,t-\tau)} - 1)$$

и

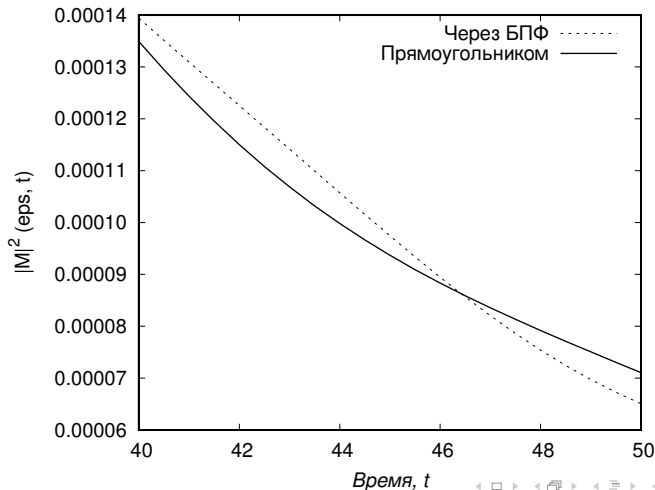
$$\hat{f}(\xi) = \int_0^\infty e^{i\tau\xi} f(\tau) d\tau,$$

то

$$\mathcal{M}(\epsilon, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i}} \hat{f}(\epsilon).$$

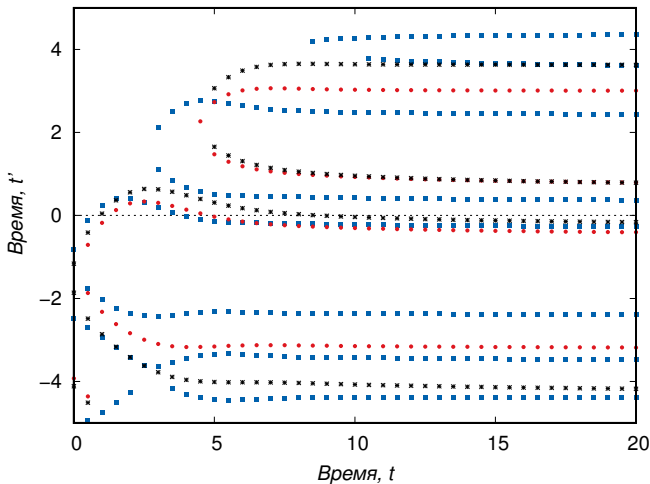
Численное решение

Значение ϵ может не совпасть с одной из частот преобразования, в таком случае используем линейное приближение.



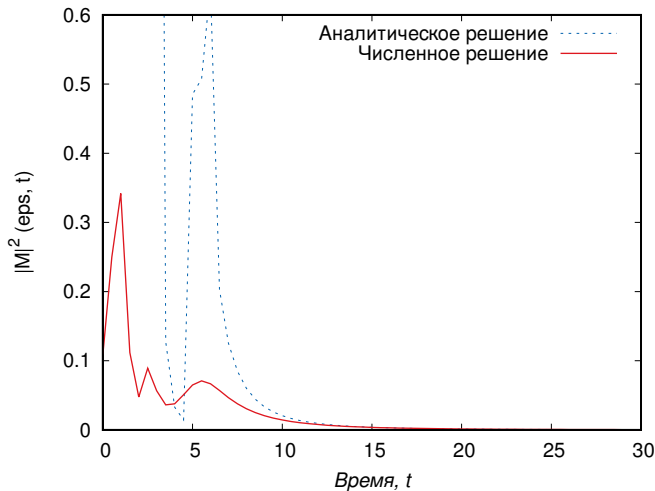
Сравнение результатов

Решения седлового уравнения для различных параметров



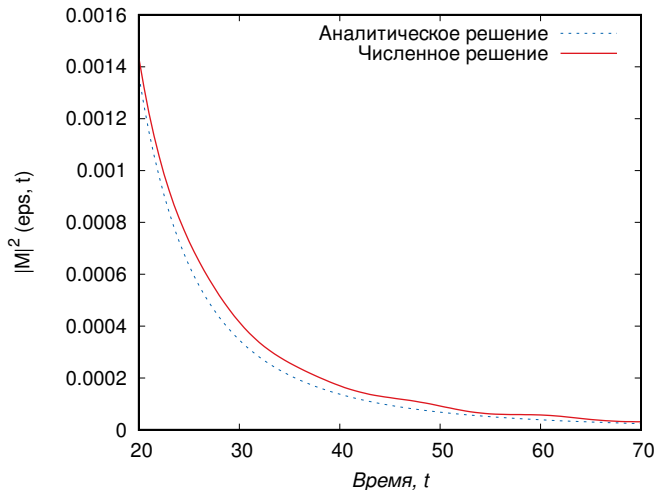
Сравнение результатов

Сравнение решений для параметров $\epsilon = 0.4$, $F_0 = 2$, $\omega = 0.8$



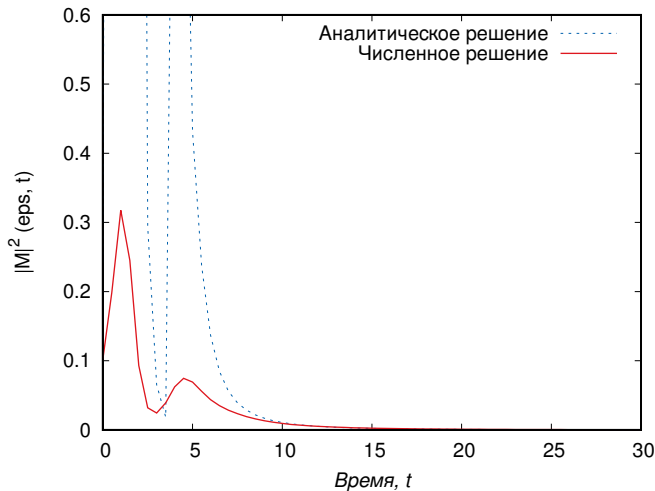
Сравнение результатов

Сравнение решений для параметров $\epsilon = 0.4$, $F_0 = 2$, $\omega = 0.8$ на отрезке $t = [20, 70]$



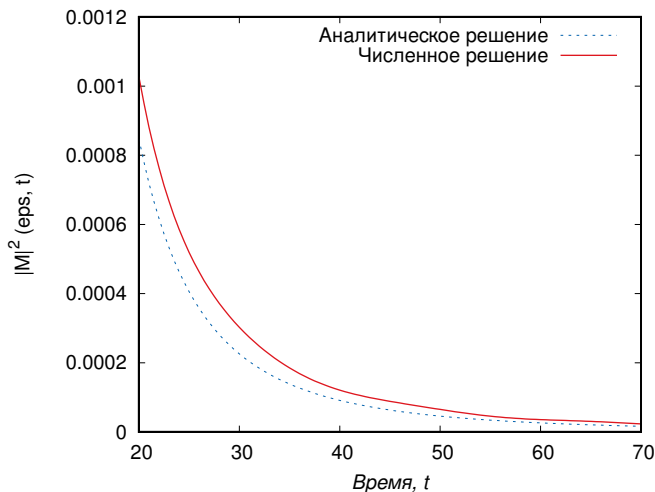
Сравнение результатов

Сравнение решений для параметров $\epsilon = 0.35$, $F_0 = 2.2$, $\omega = 0.8$



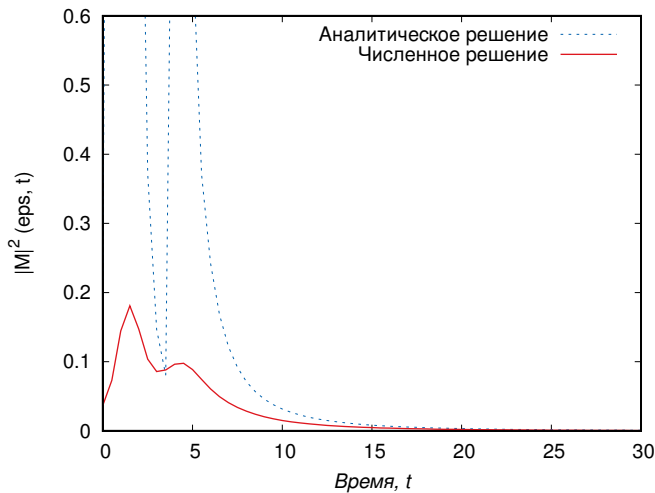
Сравнение результатов

Сравнение решений для параметров $\epsilon = 0.35$, $F_0 = 2.2$, $\omega = 0.8$
на отрезке $t = [20, 70]$



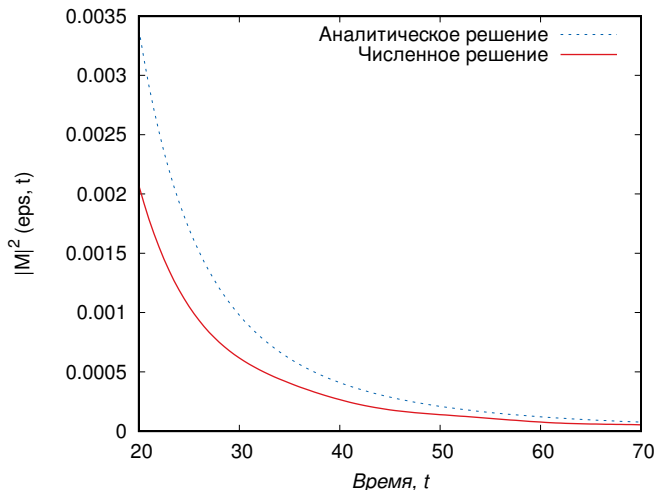
Сравнение результатов

Изменим параметр F_0 ($\epsilon = 0.35, F_0 = 1.6, \omega = 0.8$).



Сравнение результатов

Уменьшение параметра F_0 влечет за собой уменьшение величины λ , что ухудшает перевальную оценку







Использование метода перевала в нестационарных задачах квантовой механики

Махно А А

Воронежский государственный университет

Руководитель Флегель А В

-  Араманович И.Г. Левин В.И. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1969. 288 с.
-  М.В. Федорюк. Метод перевала. М.: Главная редакция физико-математической литературы изд-ва «Наука», 1977. 368 с.
-  Лаврентьев М.А Шабат Б.В. Методы теории функций комплексного переменного. М.: Главная редакция физико-математической литературы изд-ва «Наука», 1973. 736 с.
-  Wong R. Asymptotic Approximations of Integrals. NY.: SIAM, 2001. 543 p.