



POLITECHNIKA WARSZAWSKA  
Wydział Fizyki

---

Marcin Staszczak

**Metoda rozwiązywania równania  
Schrödingera na sieci wykorzystująca  
ewolucję w czasie urojonym**

Praca magisterska przygotowana  
w Zakładzie Fizyki Jądrowej  
pod kierunkiem  
prof. dr hab. Piotra Magierskiego



## *Podziękowania*

*Chciałbym serdecznie podziękować promotorowi, prof. Piotrowi Magierskiemu, za opiekę naukową, udaną współpracę oraz cenne uwagi, bez których ta praca nie mogłaby powstać.*

*Marcin Staszczak*



# Spis treści

|          |                                                                    |           |
|----------|--------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Wstęp</b>                                                       | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Metoda czasu urojonego</b>                                      | <b>5</b>  |
| 2.1      | Podstawy . . . . .                                                 | 5         |
| 2.2      | Opis metody czasu urojonego . . . . .                              | 7         |
| 2.3      | Zbieżność metody czasu urojonego . . . . .                         | 8         |
| 2.4      | Metoda rozkładu operatora ewolucji $e^{-\lambda\hat{H}}$ . . . . . | 10        |
| 2.5      | Opis procedury iteracyjnej . . . . .                               | 12        |
| 2.6      | Ortogonalizacja . . . . .                                          | 15        |
| 2.7      | Energia . . . . .                                                  | 16        |
| <b>3</b> | <b>Analiza numeryczna . . .</b>                                    | <b>21</b> |
| 3.1      | Krok czasowy $\Delta t$ , a dokładność wyliczeń . . . . .          | 22        |
| 3.2      | Efektywność metody czasu urojonego . . . . .                       | 26        |
| 3.3      | Ortogonalizacja i jej wpływ na zbieżność . . . . .                 | 28        |
| 3.4      | Energia . . . . .                                                  | 32        |
| 3.5      | Analiza metody czasu urojonego dla . . . . .                       | 34        |
| 3.6      | Podsumowanie . . . . .                                             | 42        |
| <b>4</b> | <b>Metoda czasu urojonego . . .</b>                                | <b>43</b> |
| 4.1      | Wstęp teoretyczny . . . . .                                        | 43        |
| 4.2      | Wyniki obliczeń dla okresowego potencjału . . . . .                | 46        |
| <b>5</b> | <b>Podsumowanie</b>                                                | <b>51</b> |



# Rozdział 1

## Wstęp

Od zarania mechaniki kwantowej znanych jest wiele metod rozwiązywania równania Schrödingera. Dla pojedynczej cząstki umieszczonej w zewnętrznym potencjale, jedynie w bardzo szczególnych przypadkach równanie to można rozwiązać dokładnie w sposób analityczny. Do znakomitej większości zagadnień stosuje się jedynie przybliżone metody rozwiązania, które dzieli się na metody analityczne (np. rachunek zaburzeń oraz przybliżenie semiklasyczne) oraz metody numeryczne (np. metoda strzałów, metody wariacyjne oraz metody diagonalizacji w ustalonej bazie funkcji falowych) [1].

W niniejszej pracy przedstawiono zastosowanie metody czasu urojonego do rozwiązywania równania Schrödingera na trójwymiarowej sieci przestrzennej, dla cząstki umieszczonej w zewnętrznym potencjale. Każdemu punktowi sieci przypisane są odpowiednie wartości funkcji falowych oraz potencjału przestrzennego, tzn. każda funkcja falowa oraz potencjał określone są jedynie w punktach sieci. Ciągłą funkcję  $\psi_\alpha(x, y, z)$  dyskretyzuje się i zapisuje w postaci macierzy trójwymiarowej  $\psi_\alpha(x_i, y_j, z_k)$ , gdzie:

$$x_{i+1} - x_i = \Delta x,$$

$$y_{j+1} - y_j = \Delta y,$$

$$z_{k+1} - z_k = \Delta z.$$

Podstawową zaletą omawianego sposobu rozwiązywania równania Schrödingera dla cząstki umieszczonej w zewnętrznym potencjale jest to, że dla procedury iteracyjnej metody czasu urojonego, obliczenia można rozpoczynać od dowolnego układu ortonormalnych funkcji.

Sedno metody polega na ewoluowaniu funkcji w wyniku działania na nie operatorem  $T(\lambda) = e^{-\lambda\hat{H}}$  ( $\lambda > 0$ ). W celu uproszczenia wyliczeń operator ten przybliża się operatorem  $T^{(n)}(\lambda)$  takim, że rozwinięcie obydwu operatorów w szereg potęgowy względem  $\lambda$  jest identyczne do wyrazów rzędu  $n$ , tzn.  $T^{(n)}(\lambda) = e^{-\lambda\hat{H}} + O(\lambda^{n+1})$ . Każdorazowo po działaniu na układ funkcji operatorem ewolucji  $T^{(n)}(\lambda)$ , otrzymane nowe funkcje należy zortogonalizować i znormalizować.

Taka procedura, dla odpowiednio małych wartości współczynnika  $\lambda$  oraz dla odpowiednio małych odległości między kolejnymi punktami sieci przestrzennej  $(x_i, y_j, z_k)$ , prowadzi do zbiegania ewoluowanych funkcji do funkcji własnych hamiltonianu  $\hat{H}$ .

Należy podkreślić, że ortogonalizowanie ewoluowanych stanów jest integralną częścią omawianej metody czasu urojonego, a w niniejszej pracy do tego celu stosowano metodę Grama - Schmidta, jak i metodę ortogonalizacji przez diagonalizację.

W rozdziale 2 omówiono podstawy metody czasu urojonego. Pokazano, iż metoda ta jest zbieżna oraz to, że zastosowanie odpowiedniego operatora ewolucji prowadzi do otrzymania funkcji i wartości własnych hamiltonianu. Omówiono również metodę ortogonalizacji przez diagonalizację oraz wpływ jaki na dokładność wyliczeń może mieć sposób obliczania energii.

Dokładność metody czasu urojonego przeanalizowano w rozdziale 3 w zależności od doboru różnych parametrów oraz rzędu rozkładu operatora ewolucji. Omówiono również wpływ jaki na zbieżność ma wybór metody ortogonalizowania ewoluowanych funkcji. Analizy tej dokonano na przykładzie potencjału oscylatora harmonicznego, ponieważ wtedy można dokładnie obliczyć wartości własne hamiltonianu i porównać je z wartościami energii jednocząstkowych wyliczonymi w procedurze iteracyjnej wykorzystującej ewolucję w czasie urojonym. Potencjał



ten dobrano tak, aby obliczenia nie były obciążone zbyt dużym błędem, a nie tak aby był on zbliżony do rzeczywistego potencjału jądrowego. Dlatego też, w jednym z paragrafów rozdziału 3 przeanalizowano, czy dla potencjału lepiej odtwarzającego średni potencjał jądrowy, do ortogonalizacji ewoluowanych stanów korzystniej jest stosować metodę Grama - Schmidta, czy ortogonalizację przez diagonalizację.

W rozdziale 4 zastosowano metodę czasu urojonego do liczenia pasm energetycznych w przypadku potencjału okresowego.

Podsumowanie całej pracy zawiera rozdział 5.



## Rozdział 2

# Metoda czasu urojonego

Metoda czasu urojonego, jest procedurą iteracyjną, w której na układ ortonormalnych funkcji działa się operatorem  $e^{-\lambda\hat{H}}$ , otrzymane w ten sposób funkcje poddaje się następnie ortogonalizacji i normalizacji. Tak ewoluowane stany zbiegają do stanów własnych hamiltonianu  $\hat{H}$  [4, 5].

### 2.1 Podstawy

Nazwa metody wywodzi się od rozwiązania równania Schrödingera zależnego od czasu:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_j}{\partial t} = \hat{H}\psi_j(t), \quad j = 1, \dots, N. \quad (2.1)$$

Dzieląc czas na kroki czasowe  $\Delta t$  i zapisując czas w  $n$ -tym kroku czasowym jako  $t_n = n\Delta t$ , rozwiązanie równania (2.1) można zapisać w postaci:

$$|\psi_j^{(n+1)}\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}\right)|\psi_j^{(n)}\rangle, \quad j = 1, \dots, N. \quad (2.2)$$

W ten sposób funkcje falowe  $\{\psi_j^{(n+1)}\}$  w kroku czasowym  $t_{n+1}$  wyrażono poprzez

funkcje z poprzedniego kroku czasowego  $\{\psi_j^{(n)}\}$ .

Operator  $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}\right)$  ma dwie bardzo ważne własności:

- a) unitarność, która zapewnia ortonormalność stanów podczas ewolucji;
- b) gwarantuje zachowanie energii z iteracji na iterację,  
tzn.  $E_j^{(n+1)} - E_j^{(n)} = 0$  (własność ta zostanie wykazana poniżej).

Różnicę energii w kolejnych krokach czasowych, dla stanu jednocząstkowego oznaczonego indeksem  $j$  można zapisać:

$$E_j^{(n+1)} - E_j^{(n)} = \int d^3r \left( \psi_j^{(n+1)*} \hat{H} \psi_j^{(n+1)} - \psi_j^{(n)*} \hat{H} \psi_j^{(n)} \right). \quad (2.3)$$

Po wprowadzeniu macierzy gęstości

$$\langle \vec{r}' | \rho_j^{(n)} | \vec{r}' \rangle = \langle \vec{r}' | \psi_j^{(n)} \rangle \langle \psi_j^{(n)} | \vec{r}' \rangle = \psi_j^{(n)}(\vec{r}') \psi_j^{(n)*}(\vec{r}'), \quad (2.4)$$

równanie (2.3) przybiera prostszą postać:

$$E_j^{(n+1)} - E_j^{(n)} = \text{Tr} \left( \hat{H} \left( \rho_j^{(n+1)} - \rho_j^{(n)} \right) \right). \quad (2.5)$$

Na mocy (2.2) oraz wiedząc, że

$$\rho_j^{(n)} = |\psi_j^{(n)}\rangle \langle \psi_j^{(n)}|, \quad (2.6)$$

można zapisać:

$$\rho_j^{(n+1)} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}\right) \rho_j^{(n)} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}\right). \quad (2.7)$$

Po podstawieniu powyższej zależności do równania (2.5), a następnie po skorzystaniu z własności cyklicznej niezmienniczości śladu (tzn.  $\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(BCA) = \text{Tr}(CAB)$ ) widać, że

$$E_j^{(n+1)} - E_j^{(n)} = 0. \quad (2.8)$$

Tym samym pokazano, że operator ewolucji  $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}\right)$  działając na pewien stan  $\psi_j^{(n)}$  nie powoduje zmiany jego energii w kolejnych krokach czasowych.

W metodzie czasu urojonego operator ewolucji z równania (2.2) przybiera inną postać w wyniku zastąpienia kroku czasowego  $\Delta t$  przez  $-i\Delta t$ , co w konsekwencji prowadzi do niezachowania (spadku) energii. Ponadto operator  $\exp\left(-\lambda\hat{H}\right)$  (gdzie  $\lambda = \Delta t/\hbar$ ) działając na ortonormalne stany  $\{\psi_j^{(n)}\}$  utworzy układ nieortogonalnych stanów  $\{\Psi_j^{(n+1)}\}$

$$|\Psi_j^{(n+1)}\rangle = \exp\left(-\lambda\hat{H}\right)|\psi_j^{(n)}\rangle, \quad j = 1, \dots, N, \quad (2.9)$$

które należy ortogonalizować i normować w każdym kroku czasowym

$$\{\Psi_j^{(n+1)}\} \xrightarrow[+normalizacja]{ortogonalizacja} \{\psi_j^{(n+1)}\}.$$

Na otrzymany w ten sposób układ ortonormalnych funkcji  $\{\psi_j^{(n+1)}\}$  można ponownie działać operatorem ewolucji.

## 2.2 Opis metody czasu urojonego

**krok 1:** Konstrukcja układu początkowych, ortonormalnych jednocząstkowych funkcji falowych  $\{\psi_j^{(0)}\}$  oraz zdefiniowanie (wybór) hamiltonianu.

**krok 2:** Początek procedury iteracyjnej. Konstrukcja funkcji falowych zgodnie z transformacją:

$$|\Psi_j^{(n+1)}\rangle = \exp\left(-\lambda\hat{H}\right)|\psi_j^{(n)}\rangle, \quad j = 1, \dots, N. \quad (2.10)$$

**krok 3:** Ortonormalizacja funkcji falowych postaci  $\{\Psi_j^{(n+1)}\}$ , a następnie powrót z otrzymanym układem funkcji  $\{\psi_j^{(n+1)}\}$  do **kroku 2**.

Powyższa procedura iteracyjna kontynuowana jest do czasu otrzymania żądanej zbieżności, np.

$$|E_j^{(n+1)} - E_j^{(n)}| < \varepsilon. \quad (2.11)$$

Należy teraz pokazać, że taka procedura iteracyjna z transformacją (2.10) jest zbieżna i prowadzi do wartości własnych hamiltonianu  $\hat{H}$ .

### 2.3 Zbieżność metody czasu urojonego

Niech  $\{\Phi_j\}$  ( $j = 1, 2, \dots$ ) będą stanami własnymi hamiltonianu  $\hat{H}$  w porządku wzrastających energii, tzn.  $E_1 < E_2 < \dots < E_N < \dots$ . Każdą z funkcji poddawanych ewolucji w metodzie czasu urojonego można zapisać w bazie  $\{\Phi_j\}$ :

$$|\psi_j^{(n)}\rangle = c_{jk}^{(n)} |\Phi_k\rangle, \quad (2.12)$$

zatem:

$$|\Psi_j^{(n+1)}\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} c_{jk}^{(n)} \exp(-\lambda \hat{H}) |\Phi_k\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} c_{jk}^{(n)} \exp(-\lambda E_k) |\Phi_k\rangle, \quad (2.13)$$

Funkcja wykładnicza w równaniu (2.13) gwarantuje to, że jedynie stany o najniższej energii są zachowane.

W prosty sposób można pokazać, z dokładnością do pierwszego rzędu w  $\lambda$ , że transformacja:

$$|\Psi_j^{(n+1)}\rangle = e^{-\lambda \hat{H}} |\psi_j^{(n)}\rangle, \quad (2.14)$$

w granicy małych  $\lambda$  prowadzi do wartości własnych hamiltonianu  $\hat{H}$ .

Przybliżając (2.14) przez:

$$|\Psi_j^{(n+1)}\rangle = (1 - \lambda \hat{H}) |\psi_j^{(n)}\rangle + O(\lambda^2), \quad (2.15)$$

a następnie poddając ortogonalizacji Grama - Schmidta, otrzymuje się układ ortonormalnych funkcji, które można zapisać:

$$|\psi_j^{(n+1)}\rangle = \left(1 + \lambda \left(\varepsilon_{jj}^{(n)} - \hat{H}\right)\right) |\psi_j^{(n)}\rangle + 2\lambda \sum_{k=1}^{j-1} \varepsilon_{kj}^{(n)} |\psi_k^{(n)}\rangle + O(\lambda^2), \quad (2.16)$$

gdzie  $\varepsilon_{kj}^{(n)} = \langle \psi_k^{(n)} | \hat{H} | \psi_j^{(n)} \rangle$ .

Różnicę gęstości jednocząstkowej w kolejnych krokach czasowych wyraża zależność:

$$\rho_j^{(n+1)} - \rho_j^{(n)} = |\psi_j^{(n+1)}\rangle\langle\psi_j^{(n+1)}| - |\psi_j^{(n)}\rangle\langle\psi_j^{(n)}|, \quad (2.17)$$

co po skorzystaniu z (2.16), z dokładnością do pierwszego rzędu w  $\lambda$ , można zapisać w postaci:

$$\rho_j^{(n+1)} - \rho_j^{(n)} = -\lambda \left( \rho_j^{(n)} \widehat{H} (1 - \rho_j^{(n)}) + (1 - \rho_j^{(n)}) \widehat{H} \rho_j^{(n)} \right) + O(\lambda^2). \quad (2.18)$$

Różnicę energii jednocząstkowych w kolejnych krokach czasowych (2.5) wyraża teraz zależność:

$$E_j^{(n+1)} - E_j^{(n)} = -\lambda \text{Tr} \left( \widehat{H} \rho_j^{(n)} \widehat{H} (1 - \rho_j^{(n)}) + \widehat{H} (1 - \rho_j^{(n)}) \widehat{H} \rho_j^{(n)} \right), \quad (2.19)$$

natomiast po skorzystaniu z cyklicznej niezmienniczości śladu, powyższe równanie upraszcza się do:

$$E_j^{(n+1)} - E_j^{(n)} = -2\lambda \text{Tr} \left( \rho_j^{(n)} \widehat{H} (1 - \rho_j^{(n)}) \widehat{H} \right). \quad (2.20)$$

Następnie opierając się na tym, że  $\rho = \rho^2$  (co wynika z definicji macierzy gęstości (2.6)) oraz na mocy cyklicznej niezmienniczości śladu można otrzymać:

$$E_j^{(n+1)} - E_j^{(n)} = -2\lambda \text{Tr} \left( \rho_j^{(n)} \widehat{H} (1 - \rho_j^{(n)}) (1 - \rho_j^{(n)}) \widehat{H} \rho_j^{(n)} \right) + O(\lambda^2). \quad (2.21)$$

Ponieważ ślad z równania (2.21) nie może być ujemny, a energia nie może maleć w nieskończoność z iteracji na iterację, metoda czasu urojonego jest zbieżna dla odpowiednio małych wartości  $\lambda$ , a otrzymane wartości energii dążą do wartości własnych hamiltonianu.

## 2.4 Metoda rozkładu operatora ewolucji $e^{-\lambda\hat{H}}$ na czynniki z dokładnością do wyrazów 2-go i 4-go rzędu ze względu na $\lambda$

Gdy hamiltonian jest postaci:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \sum_{j=1}^N V(r_j^z), \quad (2.22)$$

działanie operatora  $e^{-\lambda\hat{H}}$  na ewoluowane funkcje wymaga rozwinięcia go w szereg potęgowy, a wtedy do ewolucji można użyć jedynie kilka pierwszych (najbardziej znaczących) członów rozwinięcia.

Okazuje się, iż znacznie korzystniejszy ze względu na numeryczną realizację zagadnienia jest rozkład operatora ewolucji na czynniki z dokładnością do wyrazów określonego rzędu w  $\lambda$ . Tak przybliżonym operatorem można bezpośrednio działać na ewoluowane funkcje, bez konieczności rozwijania go w szereg potęgowy. Wystarczy jedynie za pomocą transformaty Fouriera dokonywać przejścia z przestrzeni położenia do przestrzeni pędów i odwrotnie, a na ewoluowane funkcje działać kolejno odpowiednimi czynnikiemami przybliżonego operatora.

Najczęściej stosowanym przybliżeniem operatora ewolucji  $e^{-\lambda(\hat{T}+\hat{V})}$  jest rozkład na czynniki z dokładnością do wyrazów drugiego rzędu w  $\lambda$ :

$$T^{(2)}(\lambda) \equiv e^{-\frac{1}{2}\lambda\hat{V}} e^{-\lambda\hat{T}} e^{-\frac{1}{2}\lambda\hat{V}}. \quad (2.23)$$

W ogólności rozkład operatora ewolucji na czynniki można zapisać:

$$T(\lambda) = e^{-\lambda(\hat{T}+\hat{V})} = \prod_i^K e^{-a_i\lambda\hat{V}} e^{-b_i\lambda\hat{T}}. \quad (2.24)$$

Dobór współczynników  $a_i, b_i$  zależy od rzędu rozkładu. Ponadto należy zauważyć, że aby metoda była zbieżna, współczynniki te muszą być dodatnie, co



dla operatora postaci (2.24) jest możliwe jedynie do 2-go rzędu. Dopiero stosując dodatkowy operator:

$$\tilde{V} = \hat{V} + \frac{1}{48}\lambda^2[\hat{V}, [\hat{T}, \hat{V}]], \quad (2.25)$$

$\exp(-\lambda(\hat{T} + \hat{V}))$  można rozłożyć na czynniki z dokładnością do wyrazów 4-go rzędu ze względu na  $\lambda$ :

$$T^{(4)}(\lambda) \equiv e^{-\frac{1}{6}\lambda\hat{V}} e^{-\frac{1}{2}\lambda\hat{T}} e^{-\frac{2}{3}\lambda\tilde{V}} e^{-\frac{1}{2}\lambda\hat{T}} e^{-\frac{1}{6}\lambda\hat{V}}. \quad (2.26)$$

Rząd rozkładu operatora mówi o tym, z dokładnością do których wyrazów przy odpowiednich potęgach  $\lambda$ , rozwinięcie tego operatora w szereg potęgowy jest takie same, jak rozwinięcie operatora  $e^{-\lambda(\hat{T}+\hat{V})}$ . Na przykład dla rozkładu operatora z dokładnością do wyrazów 2-go rzędu ze względu na  $\lambda$ :

$$\begin{aligned} T(\lambda) &= e^{-\lambda(\hat{T}+\hat{V})} = 1 - \lambda(\hat{T} + \hat{V}) + \frac{1}{2}\lambda^2(\hat{T} + \hat{V})^2 + R(\lambda^3) = \\ &= 1 - \lambda\hat{T} - \lambda\hat{V} + \frac{1}{2}\lambda^2\hat{T}^2 + \frac{1}{2}\lambda^2\hat{V}^2 + \frac{1}{2}\lambda^2\hat{T}\hat{V} + \frac{1}{2}\lambda^2\hat{V}\hat{T} + R(\lambda^3); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T^{(2)}(\lambda) &= e^{-\frac{1}{2}\lambda\hat{V}} e^{-\frac{1}{2}\lambda\hat{T}} e^{-\frac{1}{2}\lambda\hat{V}} = (1 - \frac{1}{2}\lambda\hat{V} + \frac{1}{4}\lambda^2\hat{V}^2 + \dots) \times \\ &\quad \times (1 - \frac{1}{2}\lambda\hat{T} + \frac{1}{4}\lambda^2\hat{T}^2 + \dots) \times (1 - \frac{1}{2}\lambda\hat{V} + \frac{1}{4}\lambda^2\hat{V}^2 + \dots) = \\ &= 1 - \lambda\hat{T} - \lambda\hat{V} + \frac{1}{2}\lambda^2\hat{T}^2 + \frac{1}{2}\lambda^2\hat{V}^2 + \frac{1}{2}\lambda^2\hat{T}\hat{V} + \frac{1}{2}\lambda^2\hat{V}\hat{T} + R^{(2)}(\lambda^3), \end{aligned}$$

a zatem:  $T(\lambda) = T^{(2)}(\lambda) + O(\lambda^3)$ .

Metoda wykorzystująca rozkład operatora z dokładnością do wyrazów 4-go rzędu, swoją efektywność zawdzięcza temu, że dla lokalnego potencjału  $V(\vec{r})$ , również  $\tilde{V} = \hat{V} + \frac{1}{48}\lambda^2[\hat{V}, [\hat{T}, \hat{V}]]$  można uznać za lokalny efektywny potencjał. Aby wykazać tę własność wystarczy pokazać, że komutator  $[\hat{V}, [\hat{T}, \hat{V}]]$  można traktować jako lokalny.

Drugą pochodną funkcji  $f(x)$  można przybliżyć:

$$\vec{\nabla}^2 f(x) \approx \frac{1}{(\Delta x)^2} (f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)). \quad (2.27)$$

Posiłkując się zależnością (2.27) oraz dla operatora pędu postaci  $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2$ , działanie komutatora  $[\hat{V}, [\hat{T}, \hat{V}]]$  na funkcję falową  $\psi(x)$  w przypadku jednowymiarowym można zapisać:

$$\begin{aligned}
& \{2\hat{V}\hat{T}\hat{V} - \hat{V}^2\hat{T} - \hat{T}\hat{V}^2\}\psi(x) = \\
& = \frac{\hbar^2}{2m} \{ -2V(x)\vec{\nabla}^2V(x) + V(x)^2\vec{\nabla}^2 + \vec{\nabla}^2V(x)^2 \} \psi(x) \approx \\
& \approx \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \{ (V(x + \Delta x) - V(x))^2 (\psi(x + \Delta x) - \psi(x)) + \\
& + (V(x - \Delta x) - V(x))^2 (\psi(x - \Delta x) - \psi(x)) \} + \\
& + \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \{ (V(x + \Delta x) - V(x))^2 \psi(x) + (V(x - \Delta x) - V(x))^2 \psi(x) \}. \quad (2.28)
\end{aligned}$$

Działanie komutatora na funkcję falową rozłożono w ten sposób, aby otrzymać część lokalną i część Nielokalną, którą można zaniedbać, ponieważ jest małą wyższego rzędu ze względu na  $\Delta x$  w porównaniu do części lokalnej.

Zatem dla operatora pędu  $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2$ , działanie komutatora  $[\hat{V}, [\hat{T}, \hat{V}]]$  na funkcję falową można z dobrym przybliżeniem zapisać:

$$\begin{aligned}
& [\hat{V}, [\hat{T}, \hat{V}]] \psi(x) \approx \\
& \approx \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \{ (V(x + \Delta x) - V(x))^2 \psi(x) + (V(x - \Delta x) - V(x))^2 \psi(x) \} = \\
& = [2\hat{V}\hat{T}\hat{V} - \hat{V}^2\hat{T} - \hat{T}\hat{V}^2]_{loc} \psi(x) \quad (2.29)
\end{aligned}$$

Powyższe rozumowanie bezpośrednio przenosi się na przypadek trójwymiarowy.

## 2.5 Opis procedury iteracyjnej umożliwiającej rozwiązywanie równania Schrödingera

W niniejszej części przedstawiony zostanie opis procedury iteracyjnej, umożliwiającej rozwiązywanie równania Schrödingera na sieci przestrzennej, z wykorzystaniem metody czasu urojonego.

Sieć przestrzenna rozumiana jest jako zbiór punktów w trzech wymiarach o współrzędnych  $(x_i, y_j, z_k)$  gdzie :

$$\begin{aligned} i &= 1, 2, \dots, n_x; \\ j &= 1, 2, \dots, n_y; \\ k &= 1, 2, \dots, n_z. \end{aligned}$$

Punkty te oddalone są od siebie w taki sposób, że:

$$\begin{aligned} x_{i+1} - x_i &= \Delta x; \\ y_{j+1} - y_j &= \Delta y; \\ z_{k+1} - z_k &= \Delta z. \end{aligned}$$

Na skonstruowanej w ten sposób sieci przestrzennej należy opisać potencjał oraz funkcje falowe. Nie mogą one być zapisane w sposób ciągły jako  $V(x, y, z)$  oraz  $\psi_\alpha(x, y, z)$ , lecz są określone jedynie w punktach sieci tzn.  $V(x_i, y_j, z_k)$ ,  $\psi_\alpha(x_i, y_j, z_k)$ .

Zatem przed rozpoczęciem procedury iteracyjnej należy utworzyć trójwymiarowy potencjał  $V(x_i, y_j, z_k)$  oraz ortonormalny układ początkowych funkcji  $\{\psi_\alpha^{(0)}(x_i, y_j, z_k)\}$ . Funkcje te można utworzyć w prosty sposób, nadając każdej z nich wartość 1 tylko w jednym punkcie sieci, a w pozostałych punktach wartości 0. Jest to jedna z ogromnych zalet metody czasu urojonego, ponieważ ewolucję można rozpocząć z dowolnego ortonormalnego układu funkcji, a i tak w wyniku procedury iteracyjnej będą one zbiegały do funkcji własnych hamiltonianu.

Na pierwszy rzut oka wydawać się może, że po skonstruowaniu potencjału oraz początkowych funkcji falowych wystarczy działać na nie bezpośrednio operatorem  $\exp(-\lambda \hat{H})$ .

Jeśli jednak hamiltonian jest postaci:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \sum_{j=1}^N \frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \sum_{j=1}^N V(\vec{r}_j), \quad (2.30)$$

działanie  $\exp(-\lambda(\hat{T} + \hat{V}))$  na funkcje falowe  $\{\psi_\alpha^{(n)}(x_i, y_j, z_k)\}$  nie jest takie proste i można tego dokonać jedynie w sposób przybliżony. Aby uniknąć rozwijania operatora  $\exp(-\lambda(\hat{T} + \hat{V}))$  w szereg potęgowy, należy rozłożyć go na czynniki z dokładnością do określonego rzędu w  $\lambda$ . Przybliżenie operatora ewolucji przez (2.23) lub (2.26) znacznie uprości wyliczenia, ponieważ nie będzie wtedy konieczne rozwijanie operatora w szereg, a jedynie wystarczy działać takim operatorem bezpośrednio na funkcje falowe  $\{\psi_\alpha\}$  w przestrzeni położeń lub po dokonaniu transformaty Fouriera w przestrzeni pędów. Omówione zostanie to na przykładzie rozkładu operatora ewolucji na czynniki z dokładnością do 2-go rzędu w  $\lambda$ , tzn. dla:

$$T^{(2)}(\lambda) \equiv e^{-\frac{1}{2}\lambda\hat{V}} e^{-\lambda\hat{T}} e^{-\frac{1}{2}\lambda\hat{V}}.$$

Operatorem takiej postaci można dość łatwo ewoluować stany jednocząstkowe  $\{\psi_\alpha^{(n)}\}$ , posługując się w tym celu kolejno i osobno każdym z jego trzech składników.

Początkowo na  $\{\psi_\alpha^{(n)}\}$  działa się czynnikiem  $e^{-\frac{1}{2}\lambda\hat{V}}$ , w wyniku czego otrzymuje się funkcje  $\{\chi_\alpha^{(n+1)}\}$ :

$$e^{-\frac{1}{2}\lambda\hat{V}} |\psi_\alpha^{(n)}\rangle = |\chi_\alpha^{(n+1)}\rangle, \quad (2.31)$$

które następnie poddaje się transformacie Fouriera  $|\widetilde{\chi_\alpha^{(n+1)}}\rangle$  [2], przechodząc tym samym do przestrzeni pędów:

$$\{\chi_\alpha^{(n+1)}\} \xrightarrow{\text{tr. Fouriera}} \{\widetilde{\chi_\alpha^{(n+1)}}\}.$$

Na funkcje zapisane w przestrzeni pędów  $\{\widetilde{\chi_\alpha^{(n+1)}}\}$  działa się teraz bezpośrednio operatorem  $e^{-\lambda\hat{T}}$  zapisanym w reprezentacji pędowej:

$$e^{-\lambda\hat{T}} |\widetilde{\chi_\alpha^{(n+1)}}\rangle = |\widetilde{\xi_\alpha^{(n+1)}}\rangle. \quad (2.32)$$

Otrzymane w ten sposób funkcje  $\{\widetilde{\xi_\alpha^{(n+1)}}\}$  należy ponownie zapisać w przestrzeni położeń i w tym celu poddaje się je odwróconej transformacie Fouriera [2]:

$$\{\widetilde{\xi_\alpha^{(n+1)}}\} \xrightarrow{\text{odwr. tr. Fouriera}} \{\xi_\alpha^{(n+1)}\}.$$

Na  $\{\xi_\alpha^{(n+1)}\}$  można znowu bez przeszkód działać operatorem  $e^{-\frac{1}{2}\lambda\hat{V}}$ :

$$e^{-\frac{1}{2}\lambda\hat{V}}|\xi_\alpha^{(n+1)}\rangle = |\Psi_\alpha^{(n+1)}\rangle. \quad (2.33)$$

Układ funkcji  $\{\Psi_\alpha^{(n+1)}\}$  wystarczy teraz jedynie poddać ortogonalizacji i unormować.

$$\{\Psi_j^{(n+1)}\} \xrightarrow[+normalizacja]{ortogonalizacja} \{\psi_j^{(n+1)}\}.$$

Na otrzymane w ten sposób funkcje ponownie działa się operatorem ewolucji, powtarzając tym samym całą procedurę, aż do czasu uzyskania oczekiwanej zbieżności, tzn. np. jeśli  $|E_j^{(n+1)} - E_j^{(n)}| < \varepsilon$ , kiedy to uznaje się, że  $|\Psi_\alpha^{(n+1)}\rangle$  jest stanem własnym hamiltonianu  $\hat{H}$ .

## 2.6 Ortogonalizacja

Otrzymane w wyniku działania operatora ewolucji (w metodzie czasu urojonego) funkcje należy poddawać każdorazowo ortogonalizacji i normalizacji. Jako metodę ortogonalizacji wybrać można ortogonalizację Grama - Schmidta [3]. Jednak ortogonalizacja przez diagonalizację mimo, iż wymaga większej ilości wyliczeń może często prowadzić do szybszej zbieżności ewoluowanych funkcji [5]. Dlatego też warto ją omówić i rozważyć jej zastosowanie w metodzie czasu urojonego.

W wyniku działania operatorem ewolucji  $T(\lambda)$  na układ ortogonalnych wektorów  $\{|\psi_j^{(n)}\rangle\}$  powstaje układ nieortogonalnych wektorów  $\{|\Psi_j^{(n+1)}\rangle\}$ :

$$|\Psi_j^{(n+1)}\rangle = T(\lambda)|\psi_j^{(n)}\rangle, \quad j = 1, \dots, N. \quad (2.34)$$

W celu poddania tych wektorów ortogonalizacji przez diagonalizację należy utworzyć macierz:

$$M_{ij} = \langle \Psi_i^{(n+1)} | \Psi_j^{(n+1)} \rangle, \quad (2.35)$$

a następnie rozwiązać dla niej zagadnienie własne, tzn.

$$\sum_j M_{ij} c_j^{(k)} = m_k c_i^{(k)}. \quad (2.36)$$

Nowy zortogonalizowany stan można zapisać w postaci:

$$|\psi_j^{(n+1)}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{m_j}} \sum_i c_i^{(j)} |\Psi_i^{(n+1)}\rangle, \quad (2.37)$$

gdzie aby spełniony był warunek ortonormalności musi zachodzić:

$$\begin{aligned} \langle \psi_i^{(n+1)} | \psi_j^{(n+1)} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{m_i m_j}} \sum_{k,l} c_k^{(i)} c_l^{(j)} \langle \Psi_k^{(n+1)} | \Psi_l^{(n+1)} \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{m_i m_j}} \sum_{k,l} c_k^{(i)} c_l^{(j)} M_{kl} = \frac{1}{\sqrt{m_i m_j}} m_j \delta_{ij} = \delta_{ij} \end{aligned}$$

Ponadto widać, że jeśli  $T(\lambda)|\psi_j^{(n)}\rangle = e^{-\lambda E_j}|\psi_j^{(n)}\rangle$ , to wartości własne  $m_j$  zbiegają do  $\exp(-2\lambda E_j)$ .

Dla  $N$  stanów metoda Grama - Schmidta wymaga przeliczenia  $N(N+1)/2$  liniowych kombinacji wektorów, zaś metoda ortogonalizacji przez diagonalizację  $N^2$  przeliczeń takich liniowych kombinacji. Jednak większa ilość wyliczeń rekompensowana jest przez to, że metoda ortogonalizacji przez diagonalizację prowadzi do szybszej zbieżności (mniejszej ilości iteracji), nisko leżące stany zbiegają gwałtowniej. Można zaoszczędzić dużo czasu podczas wyliczeń „zamrażając” stany odpowiadające niższym energiom, które osiągnęły oczekiwaną zbieżność. Liczba stanów, które należy poddawać ewolucji i ortogonalizacji zmniejsza się gwałtowniej niż w procedurze Grama - Schmidta [5].

Ponadto należy dodać, iż M. Aichinger oraz E. Krotscheck w swojej pracy [5] zwracają uwagę na to, że w przypadku ortogonalizacji przez diagonalizację uzyskuje się lepszą zbieżność, gdy ewolucji podda się kilka stanów więcej niż potrzeba, szczególnie gdy różnica energii pomiędzy ostatnim zajętym, a pierwszym wolnym stanem jest mała.

## 2.7 Energia

Energię jednocząstkową w omawianej metodzie czasu urojonego można liczyć na dwa sposoby. Naturalnie, jednym jest obliczanie wartości oczekiwanej hamiltonianu. Można też wyliczyć energię ze współczynników normalizacyjnych

przeewoluowanych stanów, zanim zostaną one poddane ortogonalizacji i unormowane. W niniejszej części rozdziału przeanalizowane zostaną te metody, z uwzględnieniem błędów związanych z ich stosowaniem, dla przypadku operatora ewolucji rozłożonego na czynniki z dokładnością do wyrazów określonego rzędu ze względu na  $\lambda$ .

• energia wyliczona z norm funkcji

Gdy na ortonormalny układ funkcji  $\{\psi_j^{(k)}\}$  działać operatorem  $\exp(-\lambda\hat{H})$

$$|\Psi_j^{(k+1)}\rangle = \exp(-\lambda\hat{H})|\psi_j^{(k)}\rangle, \quad j = 1, \dots, N, \quad (2.38)$$

wtedy:

$$\langle\Psi_j^{(k+1)}|\Psi_j^{(k+1)}\rangle = \langle\psi_j^{(k)}|e^{-\lambda\hat{H}}e^{-\lambda\hat{H}}|\psi_j^{(k)}\rangle = e^{-2\lambda E_j^{(k)}}, \quad (2.39)$$

a zatem energię stanu  $j$  można zapisać:

$$E_j^{(k)} = -\frac{1}{2\lambda} \ln \left( \langle\Psi_j^{(k+1)}|\Psi_j^{(k+1)}\rangle \right). \quad (2.40)$$

Ponieważ w omawianym przypadku, dla metody czasu urojonego, operator ewolucji jest równy operatorowi  $\exp(-\lambda\hat{H})$  jedynie z dokładnością do wyrazów odpowiedniego rzędu w  $\lambda$ , tzn.

$$T^{(n)}(\lambda) = e^{-\lambda\hat{H}} + O(\lambda^{n+1}), \quad (2.41)$$

otrzymane w wyniku działania nim na układ ortonormalnych stanów  $\{|\psi_j^{(k)}\rangle\}$ , nowe wektory

$$|\tilde{\Psi}_j^{(k+1)}\rangle = T^{(n)}(\lambda)|\psi_j^{(k)}\rangle, \quad j = 1, \dots, N, \quad (2.42)$$

są równe stanom własnym (2.38) z dokładnością do wyrazów rzędu  $\lambda^n$ , tzn.

$$|\tilde{\Psi}_j^{(k+1)}\rangle = |\Psi_j^{(k+1)}\rangle + \lambda^{n+1}|\varphi_j^{(k)}\rangle + \dots \quad (2.43)$$

Na podstawie powyższego widać, że wyliczona z normy  $\langle\tilde{\Psi}_j^{(k+1)}|\tilde{\Psi}_j^{(k+1)}\rangle$  wartość energii obciążona jest pewnym błędem wynikającym z postaci operatora ewolucji.

Przez analogię z (2.39) można zapisać:

$$\begin{aligned}
e^{-2\lambda\tilde{E}_j^{(k)}} &= \langle \tilde{\Psi}_j^{(k+1)} | \tilde{\Psi}_j^{(k+1)} \rangle = \langle \psi_j^{(k)} | T^{(n)}(\lambda) T^{(n)}(\lambda) | \psi_j^{(k)} \rangle = \\
&= \langle \psi_j^{(k)} | \left( e^{-\lambda\hat{H}} + O(\lambda^{n+1}) \right) \left( e^{-\lambda\hat{H}} + O(\lambda^{n+1}) \right) | \psi_j^{(k)} \rangle = \\
&= \langle \psi_j^{(k)} | e^{-2\lambda\hat{H}} | \psi_j^{(k)} \rangle + \lambda^{n+1} \left( \langle \varphi_j^{(k)} | e^{-\lambda\hat{H}} | \psi_j^{(k)} \rangle + \langle \psi_j^{(k)} | e^{-\lambda\hat{H}} | \varphi_j^{(k)} \rangle \right) + \\
&\quad + \lambda^{2(n+1)} \langle \varphi_j^{(k)} | \varphi_j^{(k)} \rangle = \\
&= e^{-2\lambda E_j^{(k)}} + \lambda^{n+1} e^{-\lambda E_j^{(k)}} \eta + \dots
\end{aligned} \tag{2.44}$$

Otrzymano zatem:

$$e^{-2\lambda\tilde{E}_j^{(k)}} \approx e^{-2\lambda E_j^{(k)}} + \lambda^{n+1} e^{-\lambda E_j^{(k)}} \eta. \tag{2.45}$$

Powyższa równość po zlogarytmowaniu przybiera postać:

$$-2\lambda\tilde{E}_j^{(k)} \approx -\lambda E_j^{(k)} + \ln \left( \exp(-\lambda E_j^{(k)}) + \lambda^{n+1} \eta \right) \tag{2.46}$$

Korzystając z twierdzenia Taylora ( $f(a+h) = f(a) + h/1! f'(a) + \dots$ ), występujący w zależności (2.46) logarytm można rozwinąć w szereg, wtedy:

$$-2\lambda\tilde{E}_j^{(k)} = -2\lambda E_j^{(k)} + \frac{\lambda^{n+1} \eta}{\exp(-\lambda E_j^{(k)})} + \dots,$$

a zatem:

$$\tilde{E}_j^{(k)} = E_j^{(k)} - \lambda^n \eta' + \dots$$

Ostatecznie można zapisać:

$$\tilde{E}_j^{(k)} = E_j^{(k)} + O(\lambda^n).$$

Z przeprowadzonej analizy widać, że energia jednocząstkowa otrzymana ze współczynników normalizacyjnych przeewoluowanych funkcji, wyliczona jest z dokładnością do wyrazów rzędu  $\lambda^{n-1}$ , gdzie  $n$  jest rzędem rozkładu operatora ewolucji.



- **wartość oczekiwana hamiltonianu**

Dość naturalnie pojawia się pytanie, czy energie liczone jako wartości oczekiwane hamiltonianu obarczone są innym błędem niż energie liczone z norm przewoluowanych funkcji. W tym celu przyjęto, iż na funkcje falowe  $\{\psi_j^{(k-1)}\}$  działa się odpowiednimi operatorami ewolucji i otrzymuje się dokładne funkcje  $\{\Psi_j^{(k)}\}$  lub funkcje przybliżone  $\{\tilde{\Psi}_j^{(k)}\}$ , tzn.:

$$\begin{aligned} e^{-\lambda \hat{H}} |\psi_j^{(k-1)}\rangle &= |\Psi_j^{(k)}\rangle; \\ T^{(n)}(\lambda) |\psi_j^{(k-1)}\rangle &= |\tilde{\Psi}_j^{(k)}\rangle = |\Psi_j^{(k)}\rangle + \lambda^{n+1} |\chi_j^{(k)}\rangle. \end{aligned}$$

Otrzymane w ten sposób funkcje należy poddać ortogonalizacji i normalizacji, i dopiero wtedy, można liczyć wartości oczekiwane hamiltonianu dla określonych stanów jednocząstkowych.

$$\begin{aligned} \{\Psi_j^{(k)}\} &\xrightarrow[+normalizacja]{ortogonalizacja} \{\psi_j^{(k)}\} \\ \{\tilde{\Psi}_j^{(k)}\} &\xrightarrow[+normalizacja]{ortogonalizacja} \{\tilde{\psi}_j^{(k)}\} \end{aligned}$$

Wartości energii odpowiadające nowo otrzymanym ortonormalnym funkcjom są równe:

$$\begin{aligned} E_j^{(k)} &= \langle \psi_j^{(k)} | \hat{H} | \psi_j^{(k)} \rangle; \\ \tilde{E}_j^{(k)} &= \langle \tilde{\psi}_j^{(k)} | \hat{H} | \tilde{\psi}_j^{(k)} \rangle. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Ponieważ:

$$|\tilde{\Psi}_j^{(k)}\rangle = |\Psi_j^{(k)}\rangle + \lambda^{n+1} |\chi_j^{(k)}\rangle,$$

to:

$$|\tilde{\psi}_j^{(k)}\rangle = |\psi_j^{(k)}\rangle + \lambda^{n+1} |\varphi_j^{(k)}\rangle, \quad (2.48)$$

co można wykazać posługując się np. ortogonalizacją Grama - Schmidta.

Korzystając z (2.48) można zapisać:

$$\langle \tilde{\psi}_j^{(k)} | \tilde{\psi}_j^{(k)} \rangle = \langle \psi_j^{(k)} | \psi_j^{(k)} \rangle + \lambda^{n+1} \left( \langle \psi_j^{(k)} | \varphi_j^{(k)} \rangle + \langle \varphi_j^{(k)} | \psi_j^{(k)} \rangle \right) + \lambda^{2(n+1)} \langle \varphi_j^{(k)} | \varphi_j^{(k)} \rangle.$$

Co z kolei po skorzystaniu z ortonormalności omawianych stanów daje:

$$1 = 1 + \lambda^{n+1} \left( \langle \psi_j^{(k)} | \varphi_j^{(k)} \rangle + \langle \varphi_j^{(k)} | \psi_j^{(k)} \rangle \right) + \lambda^{2(n+1)} \langle \varphi_j^{(k)} | \varphi_j^{(k)} \rangle. \quad (2.49)$$

Z powyższej równości widać, że człon z  $\lambda^{n+1}$  jest rzędu  $\lambda^{2(n+1)}$ , tzn.

$$\lambda^{n+1} \left( \langle \psi_j^{(k)} | \varphi_j^{(k)} \rangle + \langle \varphi_j^{(k)} | \psi_j^{(k)} \rangle \right) = O(\lambda^{2(n+1)}). \quad (2.50)$$

Energię wyliczoną jako wartość oczekiwaną hamiltonianu dla stanów jednocząstkowych  $\{\tilde{\psi}_j^{(k)}\}$  można zapisać:

$$\begin{aligned} \tilde{E}_j^{(k)} &= \langle \tilde{\psi}_j^{(k)} | \hat{H} | \tilde{\psi}_j^{(k)} \rangle = \langle \psi_j^{(k)} | \hat{H} | \psi_j^{(k)} \rangle + \lambda^{n+1} \left( \langle \psi_j^{(k)} | \hat{H} | \varphi_j^{(k)} \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \langle \varphi_j^{(k)} | \hat{H} | \psi_j^{(k)} \rangle \right) + \lambda^{2(n+1)} \langle \varphi_j^{(k)} | \hat{H} | \varphi_j^{(k)} \rangle = \\ &= E_j^{(k)} + \lambda^{n+1} E_j^{(k)} \left( \langle \psi_j^{(k)} | \varphi_j^{(k)} \rangle + \langle \varphi_j^{(k)} | \psi_j^{(k)} \rangle \right) + \lambda^{2(n+1)} \langle \varphi_j^{(k)} | \hat{H} | \varphi_j^{(k)} \rangle. \end{aligned}$$

Człon z  $\lambda^{n+1}$  występujący w powyższej równości jest rzędu  $\lambda^{2(n+1)}$  (2.50) i dlatego wartość błędu energii wyznaczonej w ten sposób jest również tego samego rzędu, tzn.

$$\tilde{E}_j^{(k)} = E_j^{(k)} + O(\lambda^{2(n+1)}). \quad (2.51)$$

Pokazano tym samym, że wartość oczekiwana hamiltonianu (2.47) wyliczana jest ze znacznie większą dokładnością, niż wartość energii liczona z norm ewoluowanych stanów (2.44).

## Rozdział 3

# Analiza numeryczna metody czasu urojonego

W rozdziale tym omówiony zostanie wpływ, jaki na dokładność wyliczeń ma przybliżenie operatora ewolucji przez jego rozkład na czynniki z dokładnością do wyrazów 2-go rzędu, w porównaniu do procedury iteracyjnej wykorzystującej rozkład operatora na czynniki z dokładnością do wyrazów 4-go rzędu. Przeanalizowane zostaną również metody ortogonalizacji ewoluowanych funkcji (ortogonalizacja Grama - Schmidta i ortogonalizacja przez diagonalizację) wykorzystywane w metodzie czasu urojonego. Jednak na początku, w omawianej procedurze należy dobrać współczynnik  $\lambda = \Delta t/\hbar$  tak, aby zapewniał on stosunkowo niewielki błąd otrzymywanych wartości energii jednocząstkowych, przy umiarkowanej całkowitej ilości iteracji, co bezpośrednio wiąże się z czasem dokonywanych wyliczeń.

Analizy numerycznej metody czasu urojonego można dokonać jedynie wtedy, gdy wyliczone wartości energii jednocząstkowych zostaną porównane z wartościami własnymi hamiltonianu otrzymanymi w sposób analityczny. Dlatego też w niniejszym rozdziale obliczeń dokonano dla przypadku trójwymiarowego, symetrycznego oscylatora harmonicznego:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \sum_{j=1}^N \frac{m\omega^2 \vec{r}_j^2}{2}, \quad (3.1)$$

dla którego wartości energii jednocząstkowych można wyliczyć analitycznie

i wynoszą one:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{3}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.2)$$

zaś stopień zwyrodnienia  $n$ -tego poziomu wynosi  $(n^2 + 3n + 2)/2$  [1].

Błąd dokonywanych wyliczeń zdefiniowano:

$$B = \log \left\{ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left| \frac{E_j - \tilde{E}_j}{E_j} \right| \right\}, \quad (3.3)$$

gdzie:  $E_j$  - wartość własana hamiltonianu (3.2);

$\tilde{E}_j$  - wartość energii wyliczona numerycznie z zastosowaniem metody czasu urojonego;

$N$  - ilość ewoluowanych funkcji.

W rozdziale 3 oraz 4 przedstawiono wyniki wyliczeń dokonanych na sieci przestrzennej regularnej ( $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ ), utworzonej w taki sposób, że  $\hbar^2/m(\Delta x)^2 = 165.7732 MeV$ , a liczba punktów sieci w każdym z kierunków kartezjańskiego układu współrzędnych wynosi:  $n_x = n_y = n_z = 32$ .

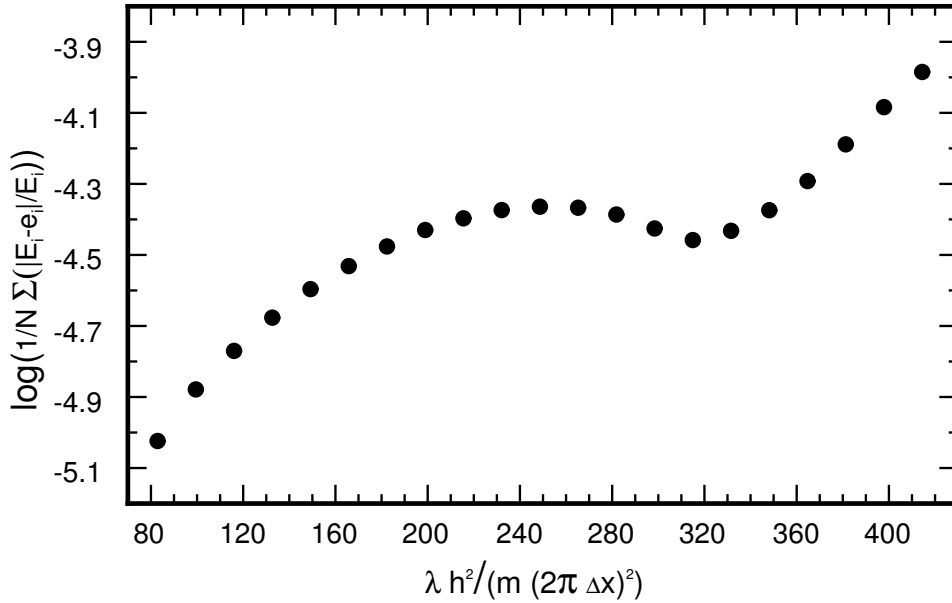
### 3.1 Krok czasowy $\Delta t$ , a dokładność wyliczeń

Dobór kroku czasowego ( $\Delta t = \hbar\lambda$ ) występującego w operatorze ewolucji ma kluczowe znaczenie dla dokładności wyliczeń. Wpływa on również bezpośrednio na ilość iteracji koniecznych do otrzymania założonej zbieżności. Im mniejszy jest współczynnik  $\lambda$ , tym większa ilość iteracji i dłuższy czas wyliczeń, ale tym samym większa dokładność. Należy wspomnieć, iż w przypadku zbyt dużego kroku czasowego funkcje nie będą zbiegały do wartości własnych hamiltonianu.

Ponieważ decydujący wpływ na wielkość kroku czasowego  $\Delta t$  (współczynnika  $\lambda$ ) ma masa cząstki  $m$ , oraz odległości między punktami sieci przestrzennej na której rozwiązywane jest równanie Schrödingera, wartość współczynnika  $\lambda$  wyrażono we współrzędnych bezwymiarowych  $m(\Delta x)^2/\hbar^2$ . Wyliczenia, które

przedstawiono w niniejszym paragrafie, dokonane były dla przypadku potencjału sferycznie symetrycznego oscylatora harmonicznego ( $\hbar\omega = 18MeV$ ), a ewolucji poddawano 100 stanów neutronowych.

Wpływ jaki na dokładność wyliczeń ma dobór współczynnika  $\lambda = \Delta t/\hbar$  ilustruje wykres - rys. 3.1.



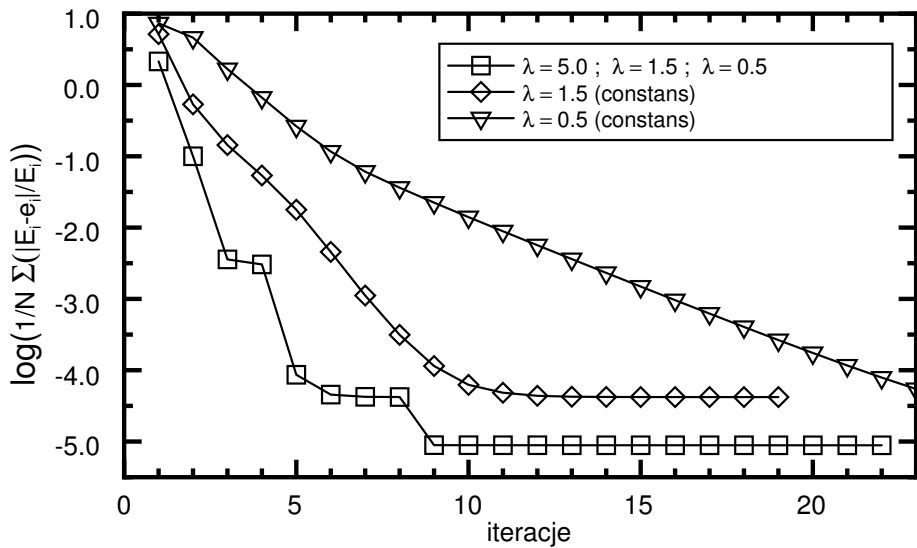
Rysunek 3.1: Dokładność wyliczeń w funkcji kroku czasowego, gdzie  $\lambda = \Delta t/\hbar$ , zaś  $\hbar^2/m(\Delta x)^2 = 165.7732MeV$ . Obliczeń dokonano z zastosowaniem operatora ewolucji  $T^{(4)}(\lambda)$  oraz dla ortogonalizacji Grama - Schmidta.

Widać zatem, że aby otrzymać dużą dokładność wyliczeń, należy stosować możliwie mały współczynnik  $\lambda$ , co z kolei przekłada się na wzrost ilości iteracji i wydłużenie całkowitego czasu obliczeń. Istnieje jednak sposób umożliwiający osiągnięcie dużej dokładności, przy umiarkowanym czasie trwania całej procedury iteracyjnej. W tym celu należy posłużyć się zmiennym krokiem czasowym, tzn. współczynnik  $\lambda$  może w kilku pierwszych krokach czasowych przyjmować znacznie większą wartość, a dopiero w kolejnych krokach należy zmniejszyć go, do wartości współczynnika odpowiadającego dokładności wyliczeń, którą chce się otrzymać (rys. 3.1).

Rozpoczęcie całej procedury iteracyjnej z dość dużą wartością współczynnika  $\lambda$  umożliwia szybkie osiągnięcie postaci funkcji falowych zbliżonych do funkcji własnych hamiltonianu. Otrzymane w ten sposób funkcje można następnie ewoluować ze znacznie większą dokładnością, odpowiednio zmniejszając krok czasowy (współczynnik  $\lambda$ ) w kolejnych iteracjach.

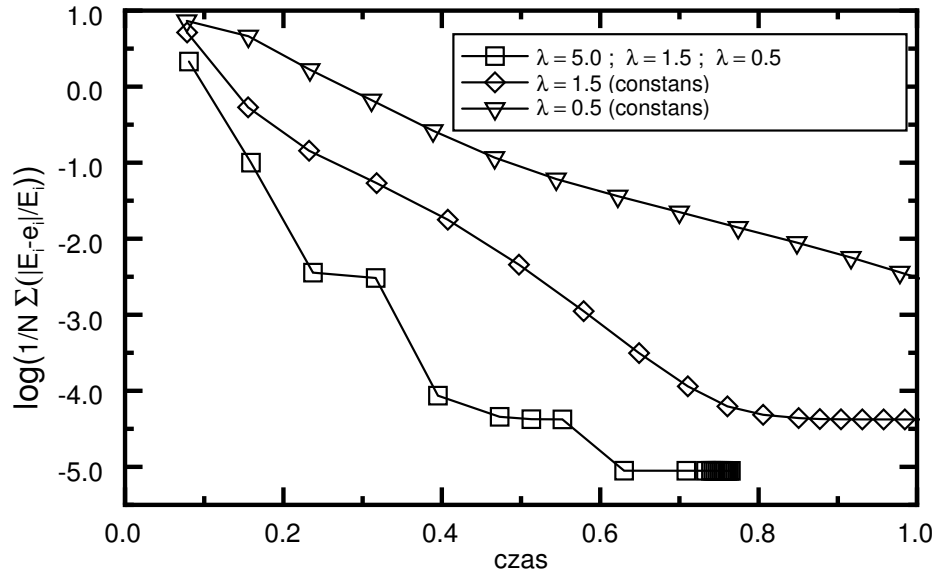
Stosując taką metodę można znacznie skrócić czas wyliczeń i zmniejszyć ilość iteracji w porównaniu do przypadku, w którym krok czasowy od razu jest odpowiednio mały, tzn. taki, który zapewnia oczekiwaną dokładność wyliczeń.

Na wykresach - rys. 3.2 oraz rys. 3.3, przedstawiono efektywność metody czasu urojonego, w której wartość współczynnika  $\lambda$  zmienia się dwukrotnie podczas trwania procedury iteracyjnej w porównaniu z przypadkami wyliczeń, dla których krok czasowy występujący w operatorze ewolucji jest stały.



Rysunek 3.2: Dokładność wyliczeń w funkcji iteracji, dla przypadku zmiennego kroku czasowego ( $-\square - \frac{\lambda \hbar^2}{m(\Delta x)^2} = 829$ ;  $\frac{\lambda \hbar^2}{m(\Delta x)^2} = 249$ ;  $\frac{\lambda \hbar^2}{m(\Delta x)^2} = 82.9$ ) oraz dla przypadku stałego kroku czasowego w całej procedurze iteracyjnej ( $-\diamond - \frac{\lambda \hbar^2}{m(\Delta x)^2} = 249$  oraz  $-\nabla - \frac{\lambda \hbar^2}{m(\Delta x)^2} = 82.9$ ).

Rozpoczęcie procedury iteracyjnej od dość dużej wartości współczynnika  $\lambda$  zapewnia w początkowych iteracjach szybsze osiągnięcie energii zbliżonych do wartości własnych hamiltonianu (rys. 3.2, 3.3). Duży krok czasowy należy jednak zmniejszyć (w tym przypadku już po kilku iteracjach), tak aby funkcje falowe można było ewoluować z większą dokładnością.



Rysunek 3.3: Dokładność wyliczeń w funkcji czasu względnego, dla przypadku zmiennego kroku czasowego ( $-\square - \frac{\lambda\hbar^2}{m(\Delta x)^2} = 829$ ;  $\frac{\lambda\hbar^2}{m(\Delta x)^2} = 249$ ;  $\frac{\lambda\hbar^2}{m(\Delta x)^2} = 82.9$ ) oraz dla przypadku stałego kroku czasowego w całej procedurze iteracyjnej ( $-\diamond - \frac{\lambda\hbar^2}{m(\Delta x)^2} = 249$  oraz  $-\nabla - \frac{\lambda\hbar^2}{m(\Delta x)^2} = 82.9$ ).

Dla kroku czasowego  $\Delta t$  dla którego  $\lambda = 1.5 MeV^{-1}$  ( $\frac{\lambda\hbar^2}{m(\Delta x)^2} = 249$ ) funkcje falowe zbiegły po nieco mniejszej ilości iteracji, niż dla przypadku, w którym wartość współczynnika  $\lambda$  wynosiła: początkowo  $5.0 MeV^{-1}$  ( $\frac{\lambda\hbar^2}{m(\Delta x)^2} = 829$ ), następnie  $1.5 MeV^{-1}$  ( $\frac{\lambda\hbar^2}{m(\Delta x)^2} = 249$ ), a ostatecznie była równa  $0.5 MeV^{-1}$  ( $\frac{\lambda\hbar^2}{m(\Delta x)^2} = 82.9$ ) (rys. 3.2). Jednak już sam czas wyliczeń, dla omawianego przypadku, jest znacznie dłuższy, co widać na rys. 3.3. Mniejsza jest również dokładność wyliczeń, gdy  $\lambda = 1.5 MeV^{-1}$  ( $\frac{\lambda\hbar^2}{m(\Delta x)^2} = 249$ ), ponieważ o dokładności wyliczeń decyduje wartość współczynnika  $\lambda$  w momencie, gdy kończy się cała procedura iteracyjna, zgodnie z przyjętym warunkiem zbieżności (2.11).

### 3.2 Efektywność metody czasu urojonego w zależności od rzędu rozkładu operatora ewolucji

Oczywiste jest to, że jeden krok procedury iteracyjnej dla metody czasu urojonego trwa dłużej (konieczna jest większa ilość wyliczeń) dla rozkładu operatora ewolucji z dokładnością do wyrazów 4-go rzędu ze względu na  $\lambda$ , niż ewolucja tej samej ilości funkcji, przy zastosowaniu rozkładu z dokładnością do wyrazów 2-go rzędu. Jednak metoda wykorzystująca operator  $T^{(4)}(\lambda)$  okazuje się efektywniejsza, dla zbliżonej dokładności wyliczeń, niż gdy do ewolucji stanów służy operator  $T^{(2)}(\lambda)$ . Dzieje się tak dlatego, ponieważ aby osiągnąć porównywalny błąd dla wyliczonych wartości energii, należy przyjąć różne wartości współczynnika  $\lambda$  dla różnych rzędów rozkładu operatora.

I tak dla potencjału trójwymiarowego jednorodnego oscylatora harmonicznego (gdzie  $\hbar\omega = 18MeV$ ) przyjęto odpowiednio:

$$\begin{aligned} \text{dla } T^{(2)}(\lambda), \quad \lambda &= 0.05MeV^{-1} \quad \left(\frac{\lambda\hbar^2}{m(\Delta x)^2} \approx 8.29\right); \\ \text{dla } T^{(4)}(\lambda), \quad \lambda &= 0.76MeV^{-1} \quad \left(\frac{\lambda\hbar^2}{m(\Delta x)^2} \approx 126\right). \end{aligned}$$

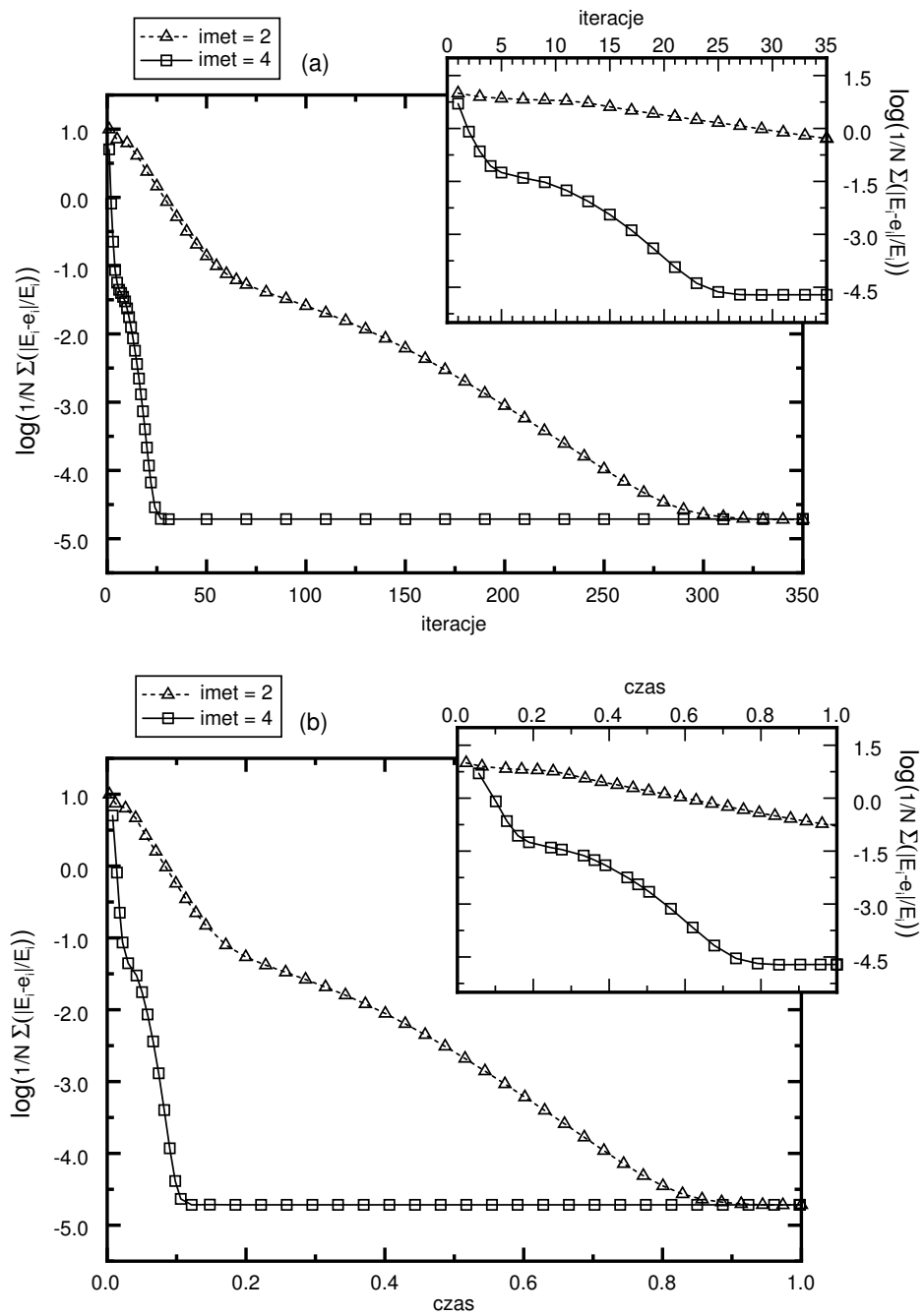
W obu przypadkach logarytm średniego błędu względnego (3.3) dla ewoluowanych 100 funkcji falowych wynosi  $B \approx -4.7$ .

Konieczność doboru różnych wartości współczynników  $\lambda$  w zależności od rzędu rozkładu operatora ewolucji, bezpośrednio przekłada się na mniejszą ilość iteracji w procedurze gdzie operator ewolucji przybliża się przez  $T^{(4)}(\lambda)$  w porównaniu do przypadku, gdy w metodzie czasu urojonego stosuje się  $T^{(2)}(\lambda)$  (rys. 3.4(a)).

W oczywisty sposób znacznie mniejsza ilość iteracji dla metody wykorzystującej rozkład z dokładnością do wyrazów 4-go rzędu w  $\lambda$  (przy zbliżonej dokładności wyliczeń) przekłada się na krótszy czas potrzebny do zakończenia procedury iteracyjnej i otrzymania oczekiwanej zbieżności (rys. 3.4(b)).

Dokonana analiza jednoznacznie wykazuje przewagę przybliżania w procedurze iteracyjnej metody czasu urojonego operatora ewolucji  $e^{-\lambda\hat{H}}$  przez jego rozkład na czynniki z dokładnością do wyrazów 4-go rzędu nad przybliżeniem przez rozkład na czynniki z dokładnością do wyrazów 2-go rzędu w  $\lambda$ . Dlatego zawsze, gdy utworzenie operatora  $T^{(4)}(\lambda)$  jest możliwe, należy rozważyć jego użycie.





Rysunek 3.4: Dokładność wyliczeń w funkcji iteracji (a) oraz w funkcji czasu względnego (b), dla operatora  $T^{(2)}(\lambda)$  ( $-\triangle-$   $imet=2$ ) oraz dla operatora  $T^{(4)}(\lambda)$  ( $-\square-$   $imet=4$ ).

### 3.3 Ortogonalizacja i jej wpływ na zbieżność

Wybór metody ortogonalizacji może znacząco wpływać zarówno na ilość iteracji konieczną do otrzymania założonej zbieżności, jak i na całkowity czas wyliczeń. W rozdziale 2 wspomniano o tym, że M. Aichinger oraz E. Krotscheck twierdzą, że w przypadku ortogonalizacji przez diagonalizację cała procedura iteracyjna trwa znacznie krócej niż, gdy do ortogonalizowania ewoluowanych funkcji stosuje się metodę Grama - Schmidta [5].

Przeprowadzona analiza dla przypadku potencjału trójwymiarowego, symetrycznego oscylatora harmonicznego pokazuje, iż faktycznie zastosowanie ortogonalizacji przez diagonalizację w metodzie czasu urojonego wymaga mniejszej ilości iteracji, niż gdy ortogonalizację ewoluowanych funkcji przeprowadza się za pomocą metody Grama - Schmidta (rys. 3.5).

Wykres - rys. 3.5(a) przedstawia średni błąd względny (3.3) w funkcji iteracji dla przypadku ewoluowanych 100 neutronowych funkcji falowych ( $\hbar^2/m(\Delta x)^2 = 165.7732 MeV$ ) oraz dla takiego potencjału oscylatora harmonicznego, gdzie  $\hbar\omega = 18 MeV$ .

Natomiast wykres - rys. 3.5(b) przedstawia tę samą zależność, lecz w tym przypadku ewolucji poddano jedynie 15 stanów oraz przyjęto nieco inną wartość  $\hbar\omega$  dla potencjału oscylatora harmonicznego, a mianowicie  $\hbar\omega = 10 MeV$ .

W obydwu przypadkach wartość współczynnika  $\lambda$  była stała i wynosiła  $\lambda = 0.5(MeV)^{-1}$  (tzn.  $\lambda\hbar^2/m(\Delta x)^2 \approx 83$ ).

Gdy jednak, tą samą wartość błędu względnego przedstawić w funkcji czasu wyliczeń, okazuje się, że dla ewoluowanych 100 funkcji falowych, procedura iteracyjna trwa dłużej, gdy stosuje się w niej ortogonalizację przez diagonalizację (rys. 3.6(a)). Należy wiązać to z tym, że w tym przypadku do osiągnięcia założonej zbieżności konieczna jest stosunkowo niewielka ilość iteracji. I dlatego nieco mniejsza ilość kroków procedury iteracyjnej w przypadku stosowania ortogonalizacji przez diagonalizację nie zrekompensuje tego, iż jeden krok omawianej metody trwa dłużej gdy stosuje się w nim ortogonalizację przez diagonalizację zamiast metody Grama - Schmidta.

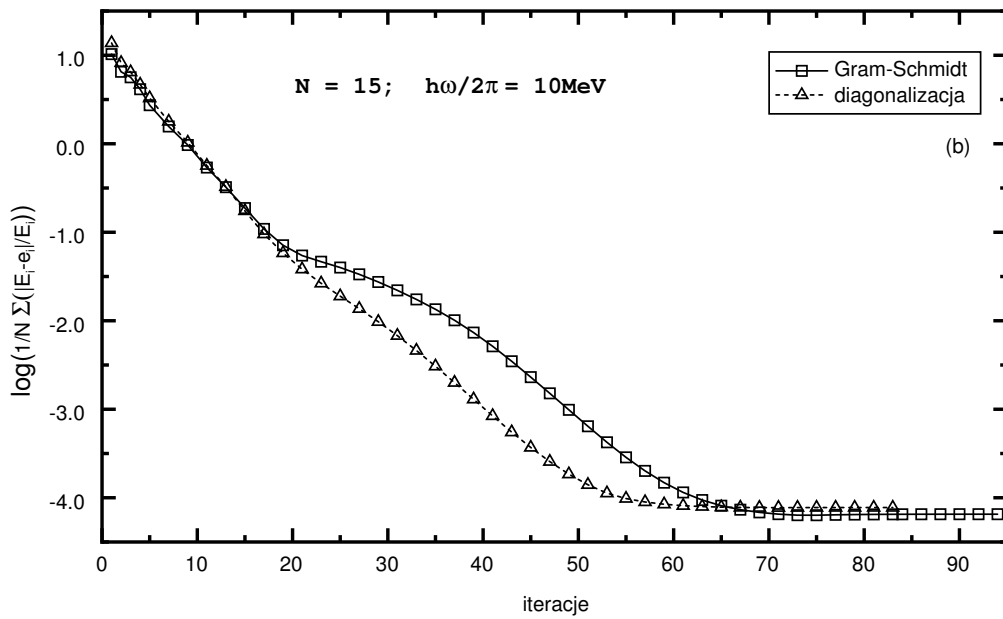
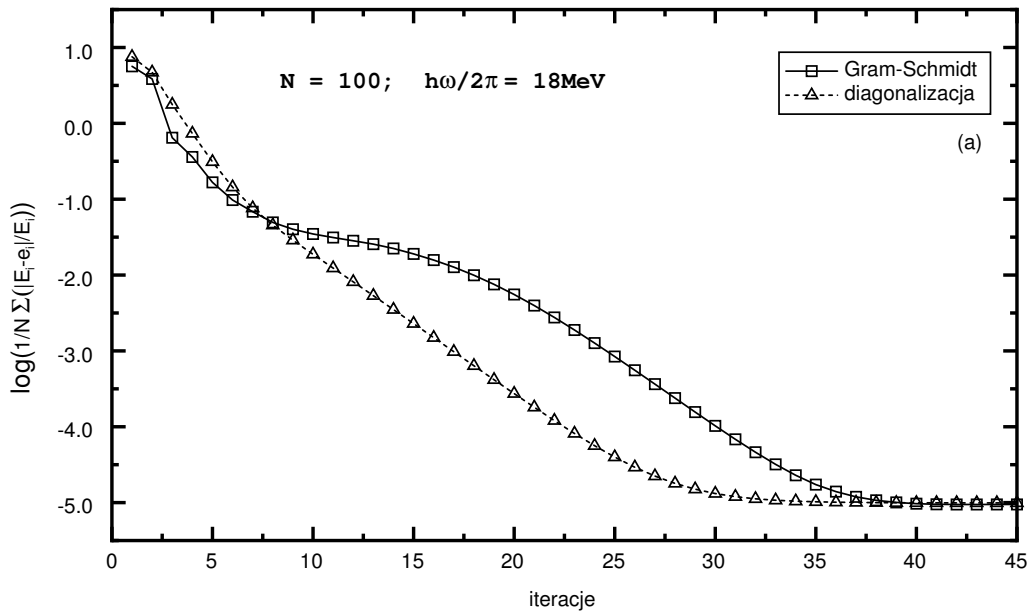
Natomiast w przypadku 15 funkcji i gdy  $\hbar\omega = 10MeV$  ortogonalizacja przez diagonalizację jest już korzystniejsza, nie tylko ze względu na mniejszą ilość iteracji (rys. 3.5(b)), ale również ze względu na krótszy czas trwania całej procedury iteracyjnej (rys. 3.6(b)). Związane jest to z większą ilością iteracji konieczną do otrzymania założonej zbieżności w tym przypadku, niż gdy ewolucji poddawano 100 stanów oraz gdy  $\hbar\omega = 18MeV$ .

Należy przypuszczać, że jeśli ilość iteracji będzie jeszcze większa, zysk wynikający z zastosowania ortogonalizacji przez diagonalizację również wzrośnie.

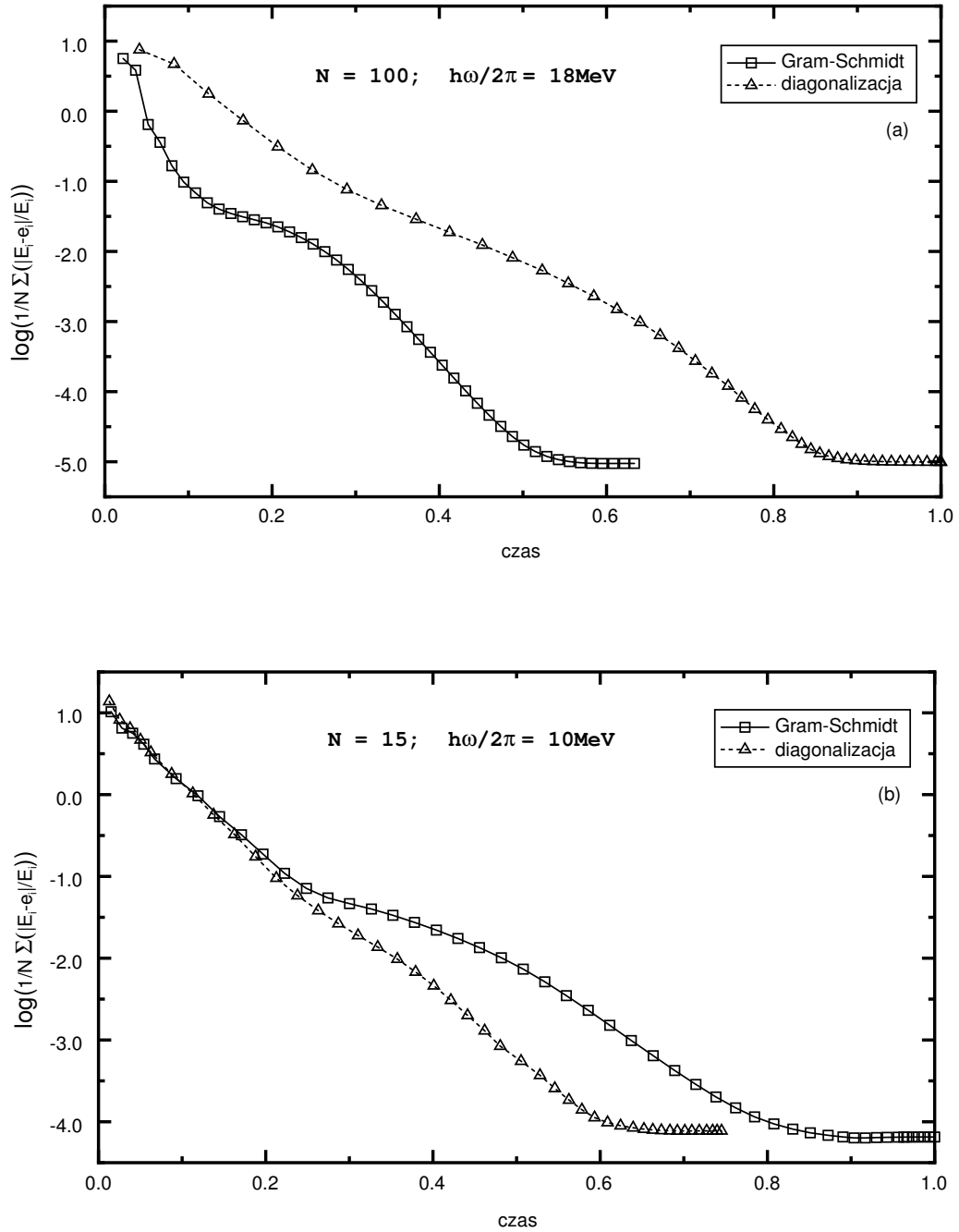
Podsumowując tę część rozdziału należy stwierdzić, że wybór metody ortogonalizacji przez diagonalizację zmniejszy ilość iteracji potrzebnych do otrzymania oczekiwanej zbieżności w porównaniu z metodą Grama - Schmidta. Nie można jednak z taką samą stanowczością wypowiedzieć się o wyższości tej metody nad ortogonalizacją Grama - Schmidta, gdy brany jest pod uwagę całkowity czas wyliczeń.

Metoda ortogonalizacji przez diagonalizację, nie okazała się tak efektywna dla omawianego powyżej przypadku oscylatora harmonicznego i ewoluowanych 100 stanów neutronowych (rys. 3.6(a)), jak można by się spodziewać po lekturze cytowanego poprzednio artykułu [5]. Jednak może ona, być znacznie bardziej użyteczna od metody Grama - Schmidta dla innego potencjału, lub innej ilości ewoluowanych funkcji falowych (rys. 3.6(b)). Dlatego też warto rozważyć jej zastosowanie, za każdym razem gdy stosuje się metodę czasu urojonego.

Dokonując wyliczeń dla potencjału sferycznie symetrycznego oscylatora harmonicznego, nie zaobserwowano znaczącego wpływu na dokładność wyliczeń w zależności od wyboru metody ortogonalizacji ewoluowanych stanów.



Rysunek 3.5: Dokładność wyliczeń w funkcji iteracji, w przypadku ortogonalizacji Grama - Schmidta ( $-\square-$  Gram-Schmidt) oraz ortogonalizacji przez diagonalizację ( $-\triangle-$  diagonalizacja). Obliczeń dokonano dla 100 funkcji falowych i  $\hbar\omega = 18 \text{ MeV}$  (a) oraz dla 15 funkcji falowych i  $\hbar\omega = 10 \text{ MeV}$  (b).



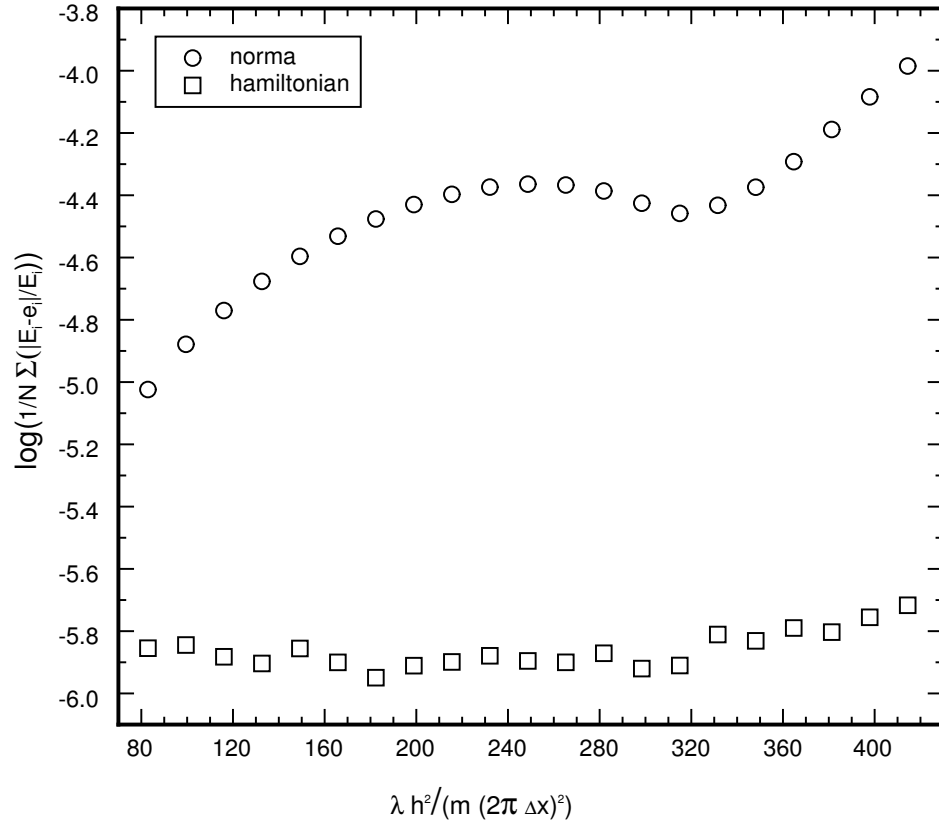
Rysunek 3.6: Dokładność wyliczeń w funkcji czasu względnego, w przypadku ortogonalizacji Grama - Schmidta ( $-\square-$  Gram-Schmidt) oraz ortogonalizacji przez diagonalizację ( $-\triangle-$  diagonalizacja). Obliczeń dokonano dla 100 funkcji falowych i  $\hbar\omega = 18 \text{ MeV}$  (a) oraz dla 15 funkcji falowych i  $\hbar\omega = 10 \text{ MeV}$  (b).

## 3.4 Energia

We wszystkich paragrafach rozdziału 3, do wyliczeń średniego błędu względnego (3.3) wykorzystywano energie jednocząstkowe  $\tilde{E}_j$  liczone z norm przeewoluowanych funkcji (2.40). Posłużono się taką metodą ze względu na krótszy czas potrzebny do obliczenia energii w każdym kroku procedury iteracyjnej, a tym samym krótszy całkowity czas wyliczeń.

W rozdziale 2 pokazano jednak (paragraf 2.7), iż obliczanie energii z wartości oczekiwanej hamiltonianu (2.47) jest metodą dokładniejszą, co ilustruje również rys. 3.7. Na wykresie tym umieszczono wartości logarytmów średniego błędu względnego energii jednocząstkowych obliczonych obydwooma metodami, dla potencjału sferycznego oscylatora harmonicznego o  $\hbar\omega = 18MeV$  i dla 100 stanów neutronowych. Ponadto należy dodać, że różnica energii wyliczona obydwooma metodami jest tym większa im większy jest współczynnik  $\lambda$  występujący w operatorze ewolucji  $T^{(n)}(\lambda)$ .

Widać zatem, że nawet jeśli podczas trwania całej procedury iteracyjnej energie jednocząstkowe liczone są z norm ewoluowanych funkcji, to po zbiegnięciu wszystkich stanów, warto jest obliczyć wartości oczekiwane hamiltonianu dla otrzymanych stanów jednocząstkowych.



Rysunek 3.7: Dokładność wyliczeń w funkcji kroku czasowego, gdzie  $\lambda = \Delta t/\hbar$ , zaś  $\hbar^2/m(\Delta x)^2 = 165.7732 \text{ MeV}$ . Obliczeń dokonano z zastosowaniem operatora ewolucji  $T^{(4)}(\lambda)$  oraz dla ortogonalizacji Grama - Schmidta. Ewolucji poddano 100 neutronowych funkcji falowych. Punkty oznaczone jako „ $\circ$ ” odpowiadają logarytmowi średniego błędu względnego liczonego dla energii otrzymanych z norm przeewoluowanych stanów. Punkty oznaczone jako „ $\square$ ” odpowiadają logarytmowi średniego błędu względnego liczonego dla energii otrzymanych z wartości oczekiwanych hamiltonianu. Wartości błędów energii liczone po zbiegnięciu całej procedury iteracyjnej.

### 3.5 Analiza metody czasu urojonego dla przypadku potencjału Woodsa - Saxona

W poprzednim paragrafie rozdziału 3 dokonano analizy numerycznej metody czasu urojonego na przykładzie potencjału oscylatora harmonicznego. Nie jest to jednak potencjał, który można by uznać, za jeden z najlepiej odtwarzających średni potencjał jądrowy, dlatego w niniejszym paragrafie przedstawiona zostanie analiza metody czasu urojonego dla przypadku potencjału Woodsa - Saxona [6].

Sferycznie symetryczny potencjał Woodsa - Saxona wyraża się wzorem:

$$V(r) = -V_0 \left[ 1 + \exp\left(\frac{r - R_0}{a}\right) \right]^{-1}. \quad (3.4)$$

W dokonanych wyliczeniach przyjęto odpowiednio:

promień  $R_0 = 5.0 \text{ fm}$ ,

rozmycie powierzchni jądra  $a = 0.64 \text{ fm}$ ,

głębokość  $V_0 = 20 \text{ MeV}$ .

Dla potencjału Woodsa - Saxona nie można jednak dokładnie obliczyć energii jednocząstkowych w sposób analityczny i dlatego (w tym przypadku) nie można ocenić jaki wpływ na dokładność wyliczeń ma dobór poszczególnych parametrów, czy też metody ortogonalizowania ewoluowanych stanów. Można jednak stwierdzić, która z metod ortogonalizacji stosowana w metodzie czasu urojonego prowadzi do szybszej zbieżności.

Ewolucji poddano 105 stanów neutronowych. Za istotne z punktu wyliczeń i otrzymanych wartości energii jednocząstkowych uznano jednak 100 „najniższych“ stanów, zaś 5 dodano po to, aby poprawić dokładność wyliczeń funkcji odpowiadających największym energiom [5]. Ewolucji poddano tak znaczną ilość stanów, z myślą o stosowaniu metody czasu urojonego dla materii jądrowej występującej w skorupie gwiazd neutronowych, gdzie jądra atomowe zanurzone są m.in. w morzu neutronów [9, 10].



Aby ocenić, która z metod ortogonalizacji prowadzi do szybszej zbieżności, przedstawiono wartość logarytmu błędu względnego energii wybranego stanu, w funkcji kroku procedury iteracyjnej lub względnego czasu wyliczeń.

Logarytm błędu względnego energii jednocząstkowej stanu  $j$  w  $k$ -tym kroku czasowym zdefiniowano:

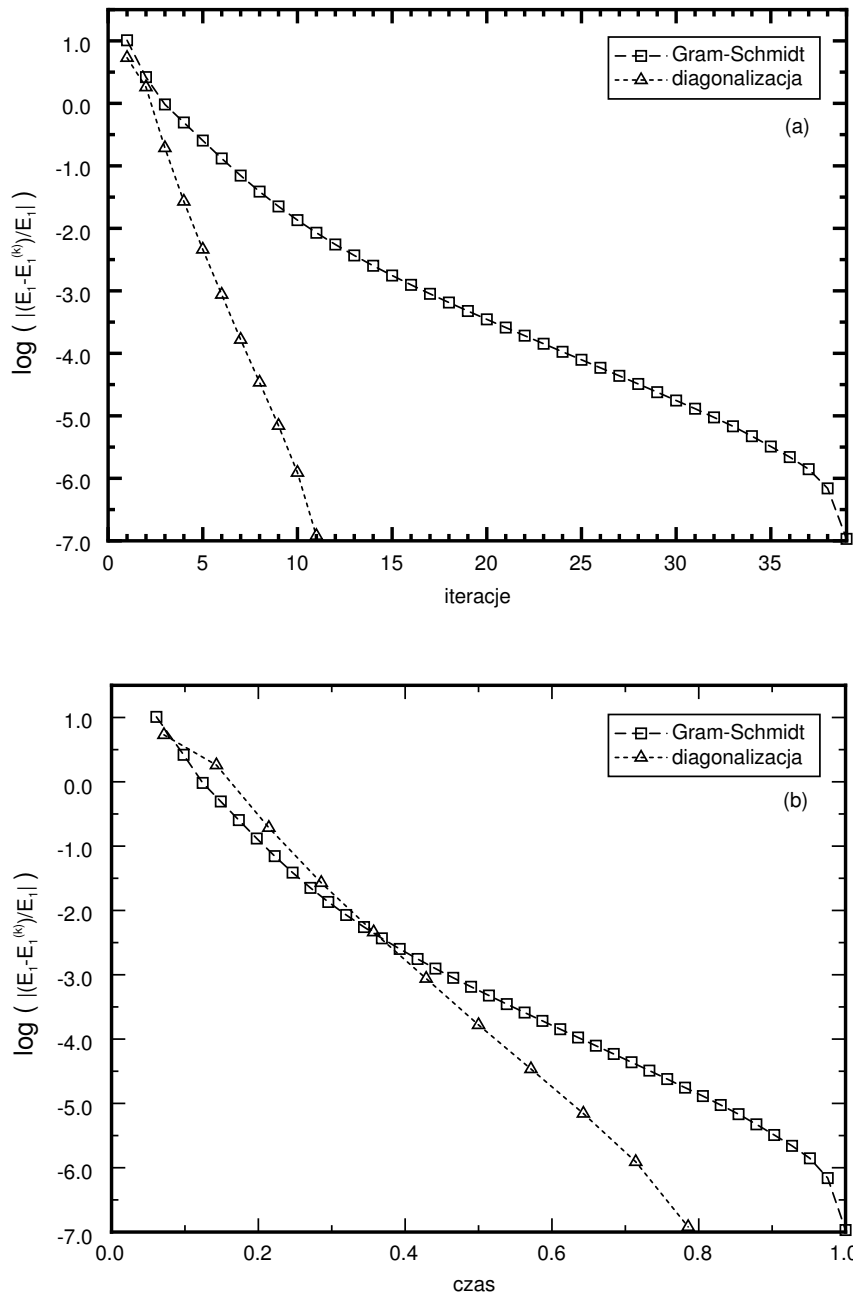
$$B_j^{(k)} = \log \left| \frac{\tilde{E}_j - E_j^{(k)}}{\tilde{E}_j} \right|, \quad (3.5)$$

gdzie:  $E_j^{(k)}$  - energia stanu  $j$  liczona w  $k$ -tym kroku czasowym,

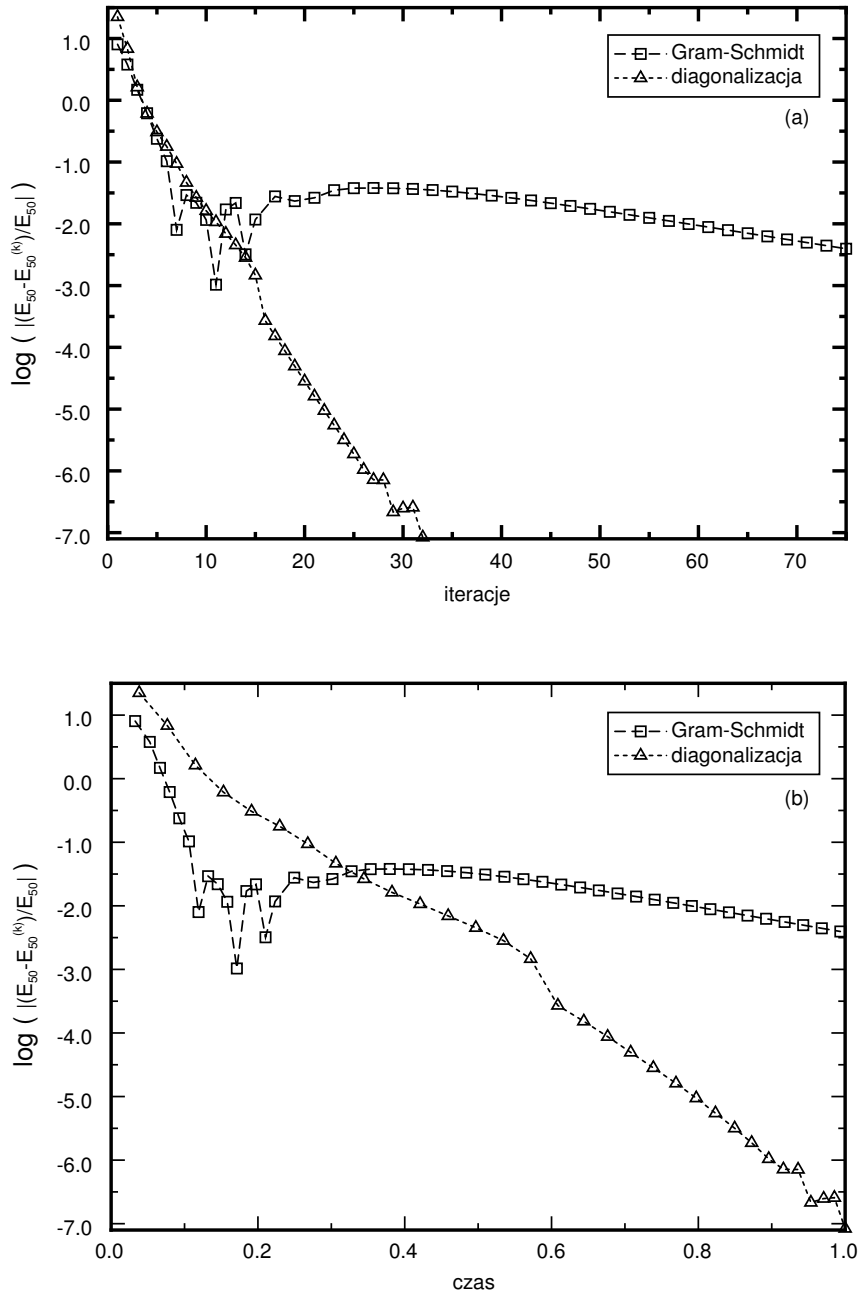
$\tilde{E}_j$  - energia stanu  $j$  otrzymana po zbiegnięciu całej procedury iteracyjnej.

Wykresy - rys. 3.8 ilustrują wartości logarytmów błędów względnych energii jednocząstkowej (3.5) pierwszego stanu ( $j = 1$ ), tj. stanu o najniższej energii w funkcji kolejnych kroków czasowych - (a) oraz w funkcji względnego czasu wyliczeń - (b). Widać, iż w omawianym przypadku, gdy stosowano ortogonalizację przez diagonalizację pierwszy stan zbiegł po znacznie mniejszej ilości iteracji ( $k = 12$ ), niż gdy dokonywano ortogonalizacji ewoluowanych funkcji przy pomocy metody Grama - Schmidta ( $k = 40$ ) (rys.3.8 (a)). Jednak różnica czasów po których pierwszy stan zbiega nie jest już tak znaczna, choć również na korzyść ortogonalizacji przez diagonalizację (rys.3.8 (b)). Dość oczywiste wydaje się to, że dla stanów odpowiadających wyższym energiom, różnice te będą jeszcze bardziej wyraźne, a zysk wynikający z ortogonalizowania przez diagonalizację będzie znaczny.

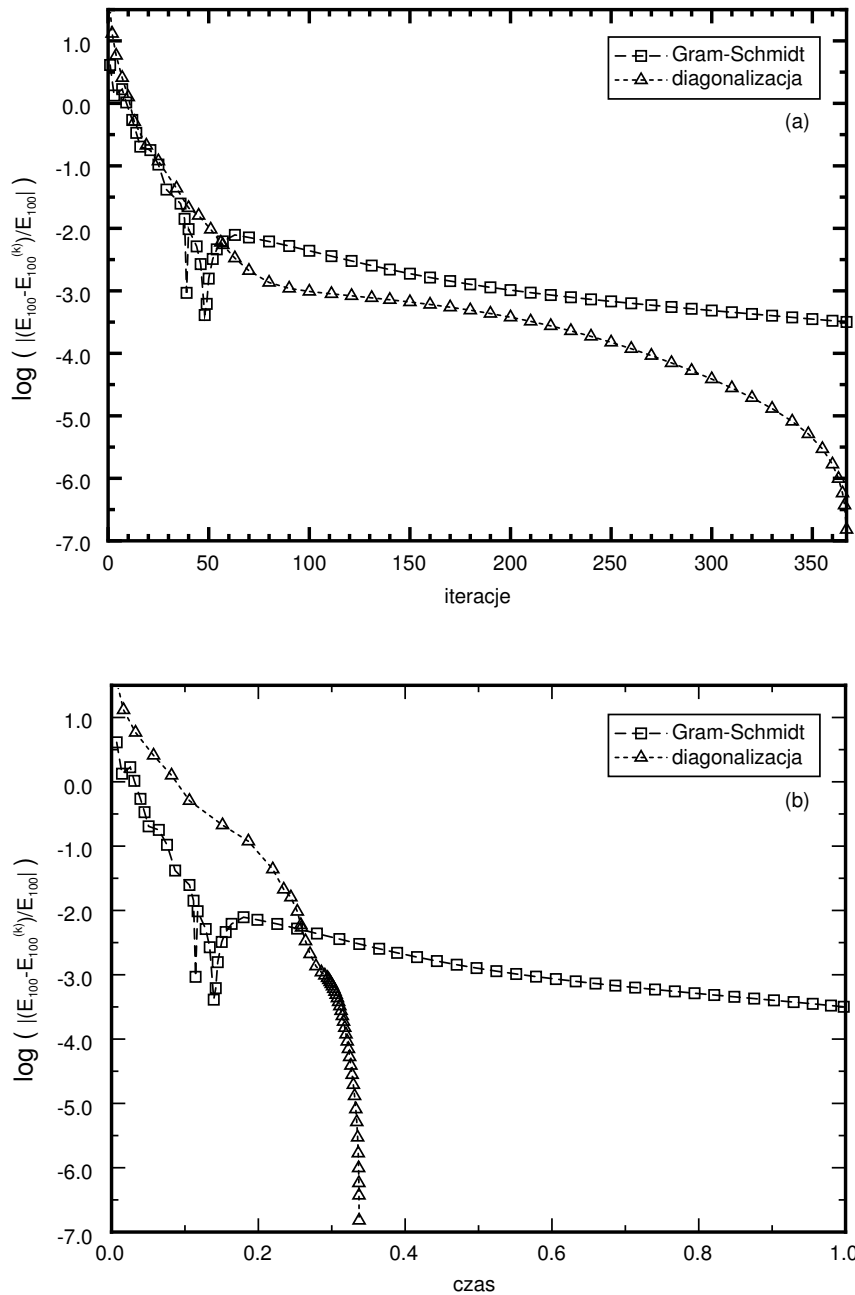
Należy podkreślić, że odpowiednie punkty z rys. 3.8, 3.9 oraz 3.10 widoczne na górnych wykresach - (a) są tymi samymi, co te na wykresach dolnych - (b), gdzie są przedstawione w funkcji czasu względnego, a nie iteracji.



Rysunek 3.8: Dokładność wyliczeń (3.5) w funkcji iteracji (a) i w funkcji względnego czasu obliczeń (b) dla pierwszego stanu neutronowego  $|\psi_1^{(k)}\rangle$ . Obliczeń dokonano dla potencjału Woodsa - Saxona (3.4) z zastosowaniem operatora ewolucji  $T^{(4)}(\lambda)$ , stosując ortogonalizację Grama - Schmidta ( $-\square-$ ) lub ortogonalizację przez diagonalizację ( $-\triangle-$ ). Krok czasowy dobrano tak, że  $\lambda = 1.0 \text{ (MeV)}^{-1}$ .



Rysunek 3.9: Dokładność wyliczeń (3.5) w funkcji iteracji (a) i w funkcji względnego czasu obliczeń (b) dla pięćdziesiątego stanu neutronowego  $|\psi_{50}^{(k)}\rangle$ . Obliczeń dokonano dla potencjału Woodsa - Saxona (3.4) z zastosowaniem operatora ewolucji  $T^{(4)}(\lambda)$ , stosując ortogonalizację Grama - Schmidta ( $-\square-$ ) lub ortogonalizację przez diagonalizację ( $-\triangle-$ ). Krok czasowy dobrano tak, że  $\lambda = 1.0 (MeV)^{-1}$ .



Rysunek 3.10: Dokładność wyliczeń (3.5) w funkcji iteracji (a) i w funkcji względnego czasu obliczeń (b) dla setnego stanu neutronowego  $|\psi_{100}^{(k)}\rangle$ . Obliczeń dokonano dla potencjału Woodsa - Saxona (3.4) z zastosowaniem operatora ewolucji  $T^{(4)}(\lambda)$ , stosując ortogonalizację Grama - Schmidta ( $-\square-$ ) lub ortogonalizację przez diagonalizację ( $-\triangle-$ ). Krok czasowy dobrano tak, że  $\lambda = 1.0(\text{MeV})^{-1}$ .

Z wykresu - rys.3.9 (a) widać, że 50 stan zbiegł po mniej niż 35 iteracjach, gdy stosowano ortogonalizację przez diagonalizację.

Porównując wykresy - rys.3.9 (a) i (b) widać, że 32 początkowe iteracje w przypadku ortogonalizacji przez diagonalizację trwają zbliżoną ilość czasu co 75 pierwszych kroków procedury iteracyjnej gdy ewoluowane stany są ortogonalizowane za pomocą metody Grama - Schmidta.

Aby jeszcze lepiej zobrazować przewagę metody ortogonalizacji przez diagonalizację nad metodą Grama - Schmidta w omawianym przypadku ewoluowanych funkcji, można dodać to, czego na zaprezentowanych wykresach nie widać. Gdy stosowano metodę ortogonalizacji przez diagonalizację, 51 stanów zbiegło - zgodnie z przyjętym warunkiem zbieżności - po 33 iteracjach. Zbliżoną ilość czasu trwało 78 początkowych kroków procedury iteracyjnej wykorzystującej metodę Grama - Schmidta, jednak doprowadziło to do zbiegnięcia zaledwie 4 stanów o najniższych energiach. Wykresy - rys.3.9 (a) oraz (b) ilustrują jak daleko jest funkcja opisująca 50 stan, od takiej postaci, do której ostatecznie zbiega, gdy stosuje się ortogonalizację Grama - Schmidta. Zbliżony czas wyliczeń i ponad dwukrotnie mniejsza ilość iteracji wystarczy, aby ten sam stan zbiegł, gdy w metodzie czasu urojonego korzysta się z ortogonalizacji przez diagonalizację.

Z wykresów - rys.3.10 widać, że zbiegnięcie 100 stanów neutronowych w omawianym przypadku z wykorzystaniem metody ortogonalizacji przez diagonalizację zajęło mniej niż 370 kroków procedury iteracyjnej i trwało znacznie krócej niż taka sama liczba iteracji gdy do ortogonalizacji stosowano metodę Grama - Schmidta. Warto dodać, iż po 370 krokach procedury iteracyjnej w której stosowano metodę Grama - Schmidta zbiegło zaledwie 15 stanów odpowiadających najmniejszym wartościom energii.

Wyliczenia przeprowadzone dla stanów neutronowych i potencjału Woodsa - Saxona pokazały, jak znacznie skraca całą procedurę iteracyjną zastosowanie metody ortogonalizacji przez diagonalizację, w porównaniu do metody Grama - Schmidta. Należało się tego spodziewać, gdyż wiąże się to ze znacznie większą ilością iteracji konieczną do otrzymania założonej zbieżności dla tak skonstruowanego

potencjału, w porównaniu do omawianego w poprzedniej części rozdziału przypadku potencjału sferycznie symetrycznego oscylatora harmonicznego.

W naturalny sposób pojawia się pytanie, czy z tak znaczną różnicą czasów trwania procedur iteracyjnych, wiąże się różnica w dokładności wyliczeń dla tych przypadków.

Dla potencjału Woodsa - Saxona nie da się policzyć dokładnie energii jednocząstkowych w sposób analityczny. Można jedynie porównać ich wartości, obliczone za pomocą metody czasu urojonego z zastosowaniem obydwu metod ortogonalizacji, do różnicy energii liczonej z norm ewoluowanych funkcji i wartości oczekiwanej hamiltonianu, gdy stosuje się konkretną metodę ortogonalizacji.

Logarytm średniej względnej różnicy energii, liczonej z norm przeewoluowanych funkcji dla obydwu metod ortogonalizacji wyraża się wzorem:

$$B_{norm}^{diag\_vs\_GS} = \log \left\{ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left| \frac{E_{j(norm)}^{diag} - E_{j(norm)}^{GS}}{E_{j(norm)}^{diag}} \right| \right\}$$

i wynosi:

$$B_{norm}^{diag\_vs\_GS} \approx -3.90.$$

Logarytm średniej względnej różnicy energii, liczonej jako wartość oczekiwana hamiltonianu dla obydwu metod ortogonalizacji wyraża się wzorem:

$$B_{wart.ocz.H}^{diag\_vs\_GS} = \log \left\{ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left| \frac{E_{\langle j|H|j \rangle}^{diag} - E_{\langle j|H|j \rangle}^{GS}}{E_{\langle j|H|j \rangle}^{diag}} \right| \right\}$$

i wynosi:

$$B_{wart.ocz.H}^{diag\_vs\_GS} \approx -3.90.$$

Logarytm średniej względnej różnicy energii, liczonej z norm przeewoluowanych funkcji oraz jako wartość oczekiwana hamiltonianu dla metody ortogonalizacji

przez diagonalizację wyraża się wzorem:

$$B_{diagonalizacja}^{norm\_vs\_wart.ocz.H} = \log \left\{ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left| \frac{E_{j(diagon)}^{norm} - E_{j(diagon)}^{w.ocz.H}}{E_{j(diagon)}^{norm}} \right| \right\}$$

i wynosi:

$$B_{diagonalizacja}^{norm\_vs\_wart.ocz.H} \approx -5.32.$$

Logarytm średniej względnej różnicy energii, liczonej z norm przeewoluowanych funkcji oraz jako wartość oczekiwana hamiltonianu dla metody ortogonalizacji Grama - Schmidta wyraża się wzorem:

$$B_{Gram-Schmidt}^{norm\_vs\_wart.ocz.H} = \log \left\{ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left| \frac{E_{j(G-S)}^{norm} - E_{j(G-S)}^{w.ocz.H}}{E_{j(G-S)}^{norm}} \right| \right\}$$

i wynosi:

$$B_{Gram-Schmidt}^{norm\_vs\_wart.ocz.H} \approx -5.33.$$

Na podstawie dokonanych wyliczeń należy stwierdzić, że w omawianym przypadku, błędy obliczeń wynikające ze stosowania jednej z metod ortogonalizacji ewoluowanych stanów są znacznie większe od błędów związanych ze sposobem liczenia energii jednocząstkowych.

## 3.6 Podsumowanie

Dokonana w niniejszym rozdziale analiza numeryczna, wykazuje przewagę stosowania w metodzie czasu urojonego rozkładu operatora ewolucji na czynniki z dokładnością do wyrazów 4-go rzędu, nad stosowaniem rozkładu tego operatora z dokładnością do wyrazów 2-go rzędu w  $\lambda$ .

Pokazano również, że gdy cała procedura iteracyjna wymaga większej ilości iteracji, wykorzystanie do ortogonalizacji ewoluowanych stanów, ortogonalizacji przez diagonalizację, zamiast metody Grama - Schmidta, powinno znacznie skrócić całkowity czas obliczeń.

W niektórych przypadkach, wybór metody ortogonalizacji może mieć zauważalny wpływ na dokładność wyliczeń.



# Rozdział 4

## Metoda czasu urojonego dla potencjału okresowego

### 4.1 Wstęp teoretyczny

W rozdziale 2 omówiono szczegółowo metodę czasu urojonego. Należy jednak przeanalizować, czy można stosować ją bez przeszkód i większych zmian, do rozwiązywania jednocząstkowego równania Schrödingera:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + \hat{V}(\vec{r}) \right\} \psi_k(\vec{r}) = E(\vec{k}) \psi_k(\vec{r}), \quad (4.1)$$

dla potencjału okresowego, tzn. gdy:  $\hat{V}(\vec{r}) = \hat{V}(\vec{r} + \vec{R}_n)$ ,

gdzie:  $\vec{R}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$ .

Wektory  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  są wektorami podstawowymi sieci prostej, zaś  $n_1, n_2, n_3$  są liczbami całkowitymi.

Na podstawie twierdzenia Blocha [7, 8], jednocząstkową funkcję falową z równania (4.1) można zapisać w postaci:

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_k(\vec{r}), \quad (4.2)$$

gdzie funkcja  $u_k(\vec{r})$  jest periodyczna ( $u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r} + \vec{R}_n)$ ).

Podstawiając następnie funkcję (4.2) do równania (4.1) można otrzymać równanie Schrödingera postaci:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla}^2 + 2i\vec{k} \cdot \vec{\nabla} - \vec{k}^2) + \hat{V}(\vec{r}) \right\} u_k(\vec{r}) = E(\vec{k})u_k(\vec{r}). \quad (4.3)$$

Widać zatem, że w równaniu (4.3), funkcję operatora energii kinetycznej pełni:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla}^2 + 2i\vec{k} \cdot \vec{\nabla} - \vec{k}^2).$$

Jeśli hamiltonian jest postaci:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V},$$

to całe rozumowanie przedstawione w rozdziale 2 przenosi się bez przeszkód na przypadek potencjału okresowego.

Należy jedynie sprawdzić, czy dla operatora ewolucji przybliżonego przez jego rozkład na czynniki z dokładnością do wyrazów 4-go rzędu (2.26), a dokładniej, czy z komutatora  $[\hat{V}, [\hat{T}, \hat{V}]]$  można wyodrębnić taki sam lokalny potencjał, jak w paragrafie 2.4.

Jeśli zatem, operator energii kinetycznej dla potencjału okresowego zapisać w postaci:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla}^2 + 2i\vec{k} \cdot \vec{\nabla} - \vec{k}^2), \quad (4.4)$$

to wystarczy sprawdzić, co dzieje się, gdy każdy z jego trzech składników wstawi się osobno do komutatora  $[\hat{V}, [\hat{T}, \hat{V}]]$  i następnie podzieli się nim na funkcję  $u_k(x)$ .

Rozumowanie dla pierwszego członu operatora (4.4) jest identyczne jak przeprowadzone poprzednio (paragraf 2.4) dla  $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2$ .

Pozostaje jedynie sprawdzić, co dzieje się gdy dwa pozostałe człony operatora (4.4) zostaną wstawione do omawianego komutatora, działającego na funkcję falową  $[\hat{V}, [\hat{T}, \hat{V}]]u_k(x)$ .

Dla drugiego członu (4.4):

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \widehat{V}, [(2i\vec{k} \cdot \vec{\nabla}), \widehat{V}] \right] u_k(x) = \\
& = -\frac{i\hbar^2 k_x}{m} \{ 2V(x)\vec{\nabla}V(x) - V(x)^2\vec{\nabla} - \vec{\nabla}V(x)^2 \} u_k(x) \approx \\
& \approx -\frac{i\hbar^2 k_x}{m\Delta x} \{ 2V(x)V(x+\Delta x)u_k(x+\Delta x) - 2V(x)^2u_k(x) - V(x)^2u_k(x+\Delta x) \\
& \quad + V(x)^2u_k(x) - V(x+\Delta x)^2u_k(x+\Delta x) + V(x+\Delta x)^2u_k(x) \} = \\
& = \frac{i\hbar^2 k_x}{m\Delta x} (V(x+\Delta x) - V(x))^2 (u_k(x+\Delta x) - u_k(x)) + \tag{4.5}
\end{aligned}$$

$$+ \frac{i\hbar^2 k_x}{m\Delta x} (V(x+\Delta x) - V(x))^2 u_k(x) \tag{4.6}$$

Z przeprowadzonej analizy wynika, że również dla drugiego członu operatora pędu (4.4), wynik działania omawianego komutatora na funkcję falową  $[\widehat{V}, [\widehat{T}, \widehat{V}]]u_k(x)$  można rozdzielić na człon nielokalny (4.5) i o rząd mniejszy w  $\Delta x$  człon lokalny (4.6). Są to jednocześnie małe wyższych rzędów ze względu na  $\Delta x$  od członu lokalnego z równania (2.28) i dlatego można je zaniedbać.

Należy jeszcze sprawdzić, jaki wkład do omawianego komutatora wnosi trzeci człon operatora pędu (4.4), tzn.:

$$\begin{aligned}
& \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \widehat{V}, [\vec{k}^2, \widehat{V}] \right] u_k(x) = \\
& = \frac{\hbar^2}{2m} \{ 2V(x)k^2V(x) - V(x)^2k^2 - k^2V(x)^2 \} u_k(x) = 0. \tag{4.7}
\end{aligned}$$

Z przeprowadzonej analizy wynika, że jedyny znaczący wkład do komutatora  $[\widehat{V}, [\widehat{T}, \widehat{V}]]$  ma pierwszy człon operatora energii kinetycznej (4.4), a zatem procedurę iteracyjną wykorzystującą ewolucję w czasie urojonym, w której operator ewolucji przybliży się przez rozkład  $exp(-\lambda\widehat{H})$  na czynniki z dokładnością do wyrazów 4-go rzędu, można bez przeszkód stosować również dla potencjału okresowego, tzn. dla operatora energii kinetycznej postaci  $\widehat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla} + i\vec{k})^2$ .

## 4.2 Wyniki obliczeń dla okresowego potencjału Woodsa - Saxona

W celu zilustrowania zastosowania metody czasu urojonego do potencjału okresowego, przedstawiono wyniki obliczeń dla przypadku okresowego potencjału Woodsa - Saxona. Miało to na celu utworzenie pewnego modelu potencjału, w jakim mogą znajdować się neutrony w skorupie gwiazd neutronowych.

Do wyliczeń przyjęto:

$$V(r) = -V_0 \left[ 1 + \exp\left(\frac{r - R_0}{a}\right) \right]^{-1}, \quad (4.8)$$

promień  $R_0 = 5.0 \text{ fm}$ ,

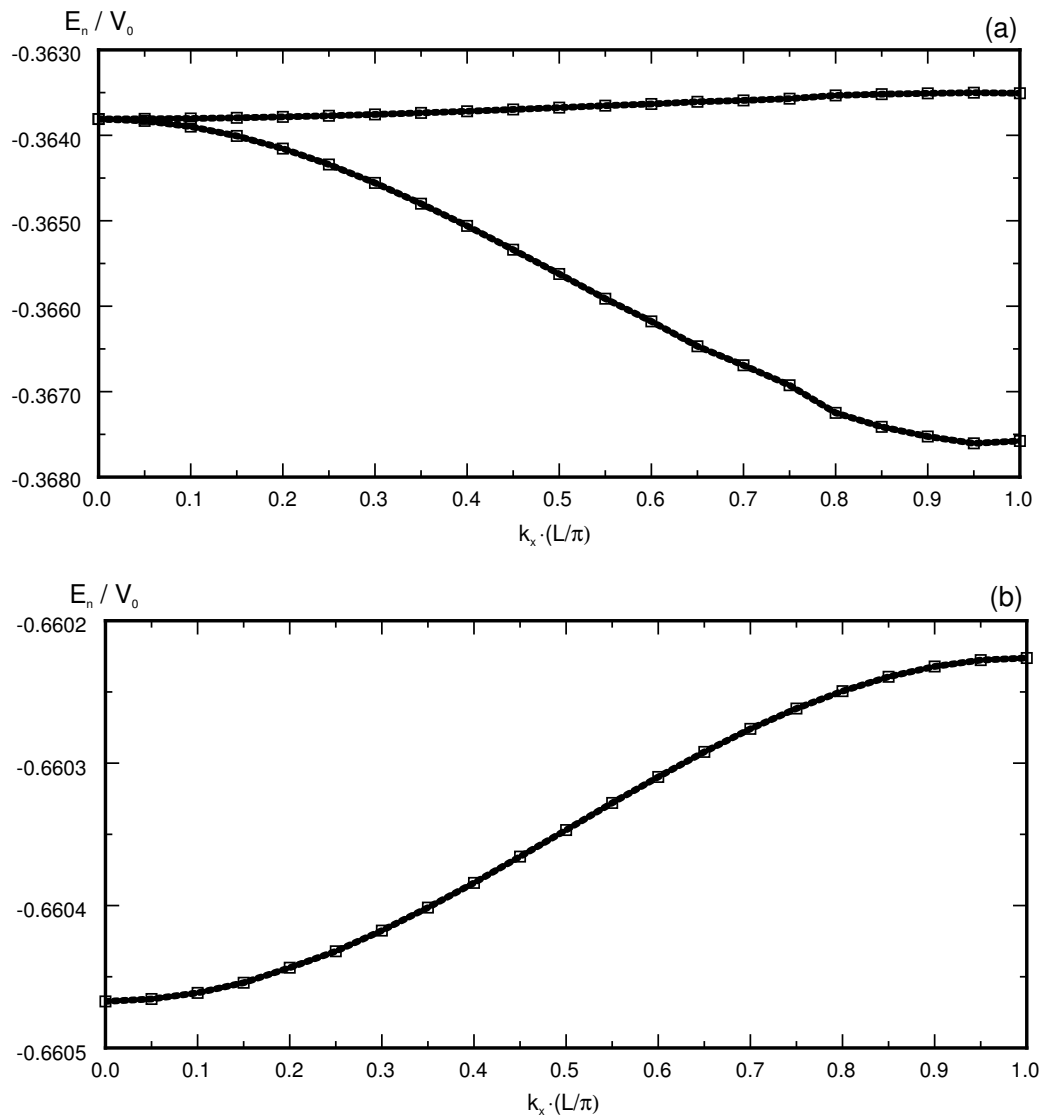
współczynnik dyfuzji  $a = 0.64 \text{ fm}$ ,

głębokość  $V_0 = 20 \text{ MeV}$ .

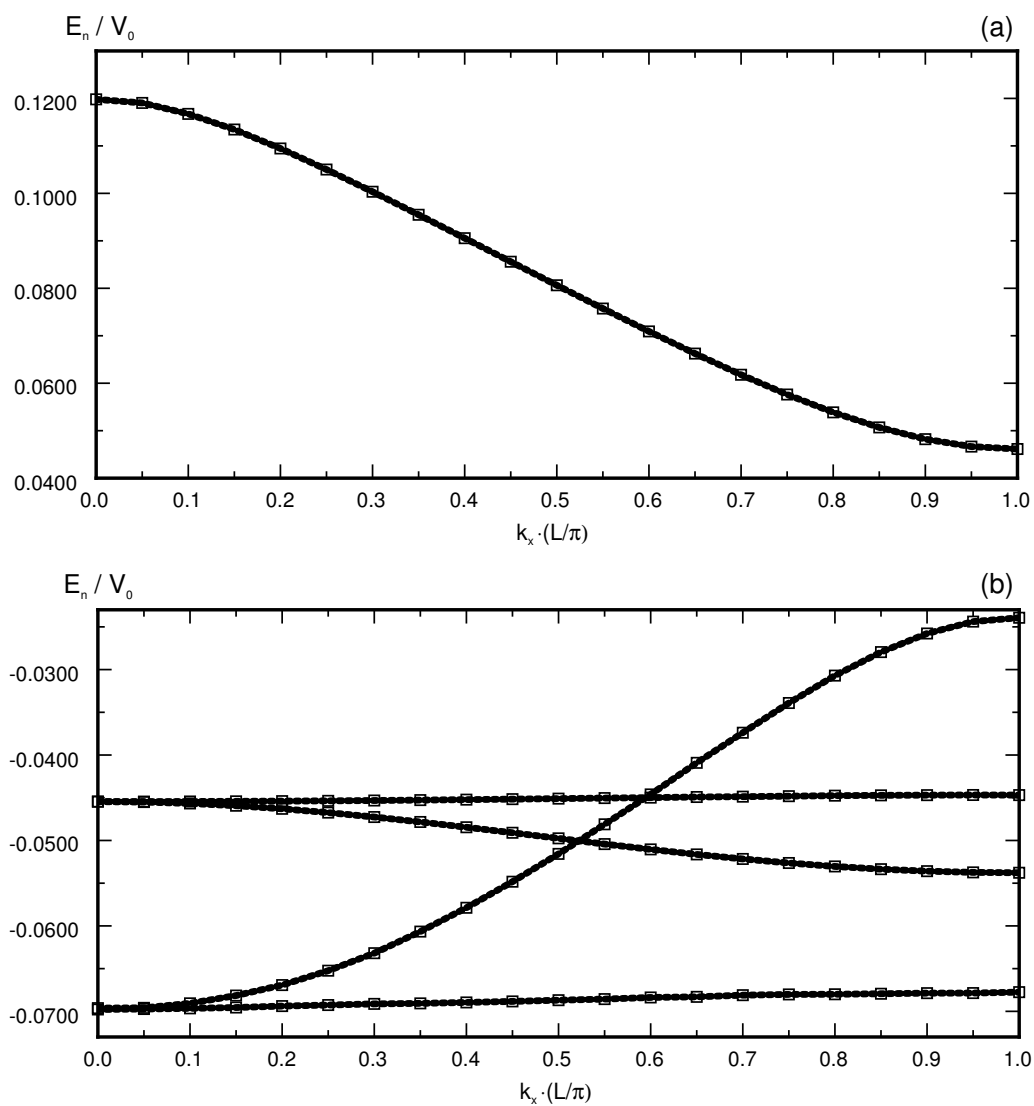
Ponadto  $\hat{V}(\vec{r}) = \hat{V}(\vec{r} + \vec{R}_n)$ , gdzie:  $\vec{R}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ . Dodatkowo przyjęto, że każdy z wektorów podstawowych sieci prostej  $\vec{a}_i$  ma długość  $L$  ( $|\vec{a}_i| = L = 16 \text{ fm}$ ).

Wybrane najniższe pasma, dla ewoluowanych 100 stanów neutronowych, zilustrowano na wykresach (rys. 4.1, 4.2, 4.3, 4.4). Wektor falowy  $\vec{k}$  zredukowano do pierwszej strefy Brillouina. Natomiast ze względu na sferyczną symetrię potencjału, przedstawiono obliczoną energię dla pasm wzdłuż osi  $k_x$  ( $k_y = k_z = 0$ ), dla przedziału  $k_x \in \langle 0; \pi/L \rangle$ .

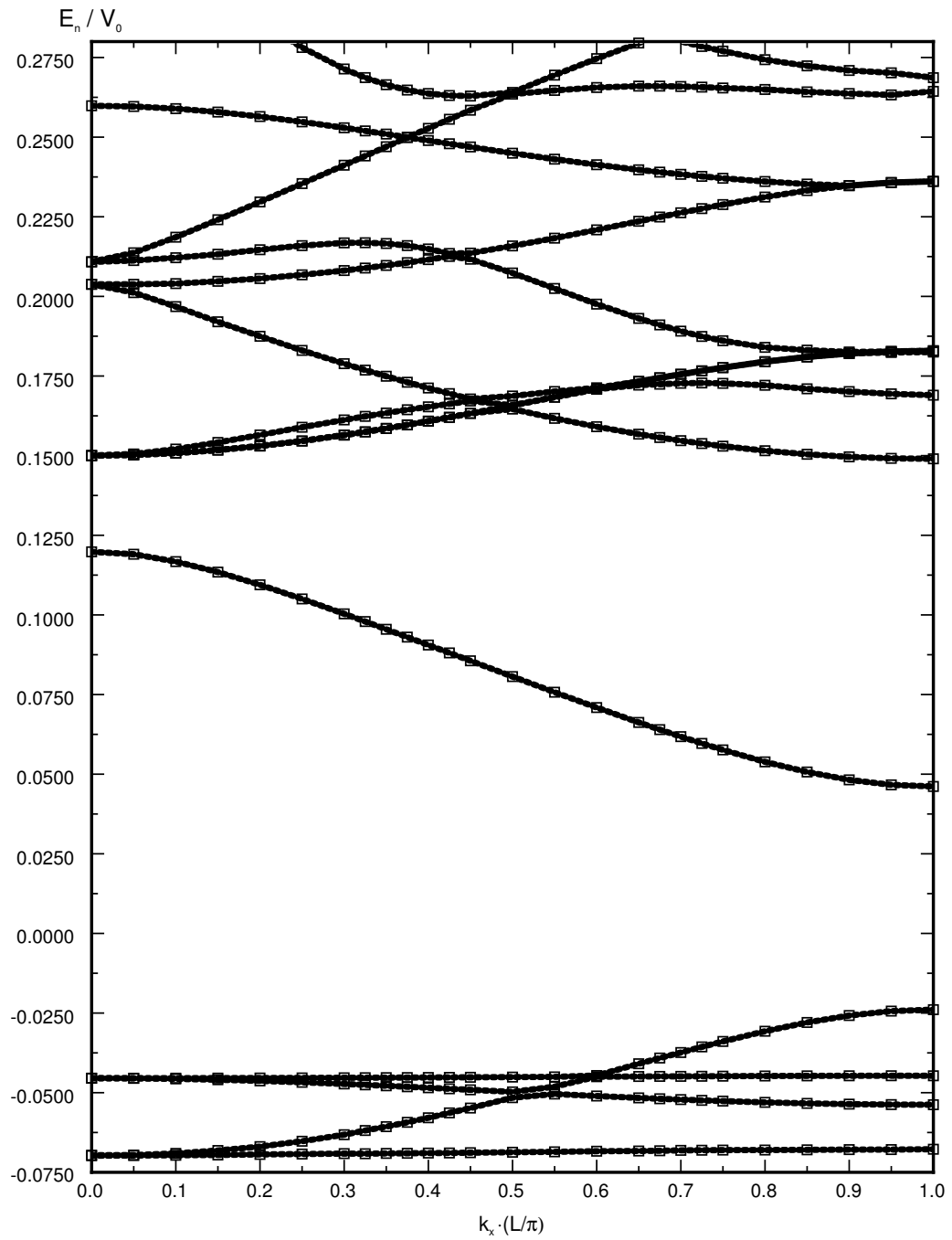
Analizując wykresy - rys. 4.1, 4.2, 4.3, 4.4 widać, że szerokość pasm rośnie wraz ze wzrostem energii jednocząstkowych, odległość między kolejnymi pasmami jest zaś coraz mniejsza. Taki wynik jest zgodny z tym czego należało się spodziewać w przypadku potencjału okresowego, gdyż szerokość pasm jest proporcjonalna do prawdopodobieństwa tunelowania cząstki przez barierę między potencjałami.



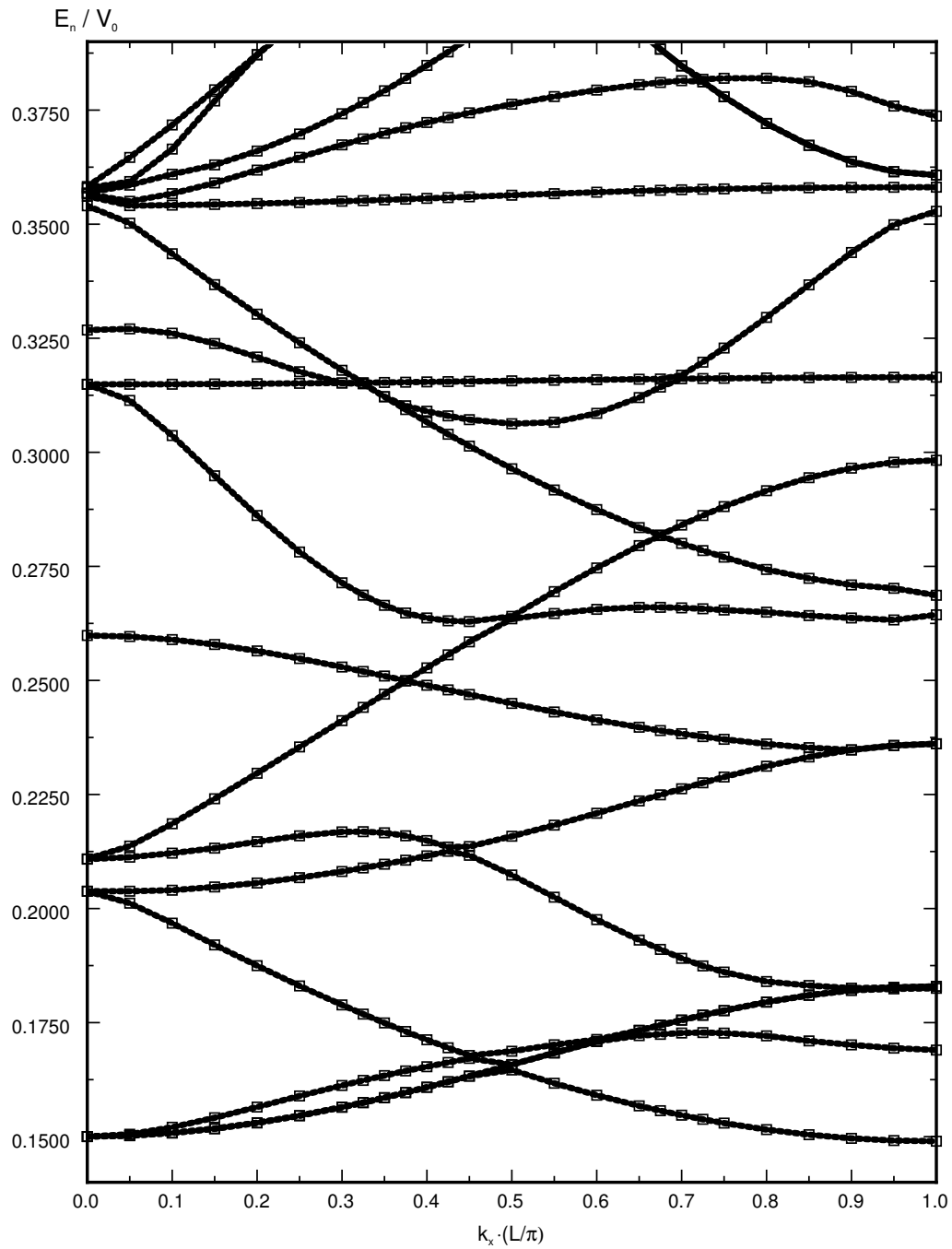
Rysunek 4.1: Dwa najniższe pasma energetyczne.



Rysunek 4.2: Wykresy ilustrują pasma energetyczne dla stanów jednocząstkowych o energiach wyższych, niż zilustrowane na wykresach rys. 4.1.



Rysunek 4.3: Pasma energetyczne z rys. 4.2 oraz kolejne (wyższe) pasma.



Rysunek 4.4: Powyżej pewnej wartości energii (w tym przypadku około  $E_n/V_0 \approx 0.15$ ) wszystkie wartości energii jednocząstkowych są dozwolone.



# Rozdział 5

## Podsumowanie

Celem pracy było rozwiązanie równania Schrödingera na trójwymiarowej sieci przestrzennej za pomocą procedury iteracyjnej wykorzystującej ewolucję w czasie urojonym. Zagadnienie dotyczyło pojedynczej cząstki umieszczonej w potencjale zewnętrznym.

Szczegółowe omówienie metody czasu urojonego zawiera rozdział 2, w którym dodatkowo jeden paragraf poświęcono opisowi ortogonalizacji przez diagonalizację, a kolejny - sposobom liczenia energii jednocząstkowej.

Analiza numeryczna metody opisana w rozdziale 3 ilustruje wpływ, jaki na dokładność wyliczeń ma dobór kroku czasowego oraz sposobu liczenia energii jednocząstkowych. Pokazano jak znaczne korzyści wiążą się ze stosowaniem rozkładu operatora ewolucji na czynniki z dokładnością do wyrazów 4-go rzędu, zamiast rozkładu na czynniki z dokładnością jedynie do wyrazów 2-go rzędu.

Całkowita ilość iteracji po której metoda zbiega jest mniejsza, gdy stosuje się w niej ortogonalizację przez diagonalizację zamiast metody Grama - Schmidta, co przekłada się również na skrócenie całkowitego czasu wyliczeń, gdy całkowita ilość kroków procedury iteracyjnej jest znaczna. Uwagę należy zwrócić na to, iż w niektórych przypadkach dobór metody ortogonalizacji może mieć zauważalny wpływ na dokładność wyliczeń.

Jeśli przeprowadzana procedura iteracyjna wymaga dużej ilości iteracji, warto, a wręcz należy stosować zmienny krok czasowy, co znacznie skróci czas wyliczeń

lub pozwoli w tym samym czasie otrzymać dokładniejsze wartości energii jedno-cząstkowych i stanów własnych.

W dalszej części pracy (rozdział 4) pokazano, że metodę czasu urojonego z powodzeniem można stosować również dla potencjału okresowego. W tym celu wystarczy jedynie odpowiednio zmodyfikować operator pędu. Znacznie zwiększa to obszar stosowalności metody czasu urojonego w wielu działach fizyki i chemii.

# Bibliografia

- [1] I. Białynicki-Birula, M. Cieplak, J. Kamiński, *Teoria kwantów - Mechanika falowa*, PWN, Warszawa 2001
- [2] T. Pang, *Metody obliczeniowe w fizyce*, PWN, Warszawa 2001
- [3] J. i M. Jankowscy, *Przegląd metod i algorytmów numerycznych*, WNT, Warszawa 1982
- [4] K. T. R. Davies, H. Flocard, S. Krieger, M. S. Weiss, *Application of the imaginary time step method to the solution of the static Hartree-Fock problem*, Nucl. Phys. A342 (1980) 111
- [5] M. Aichinger, E. Krotscheck, *A fast configuration space method for solving local Kohn-Sham equations*, Preprint submitted to Elsevier Science, 23 September 2004
- [6] B. Nerlo-Pomorska, K. Pomorski, *Zarys teorii jądra atomowego*, PWN, Warszawa 1999
- [7] J. M. Ziman, *Wstęp do teorii ciała stałego*, PWN, Warszawa 1977
- [8] A. Sukiennicki, R. Świrkwicz, *Teoria ciała stałego*, OWPW, Warszawa 1994
- [9] S. L. Saphiro, S. A. Teukolsky, *Black Holes, White Dwarfs and Neutron Stars*, Wiley, New York 1983
- [10] C. J. Pethick, D. G. Ravenhall, *Matter at Large Neutron Excess and the Physics of Neutron-Star Crusts*, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 45, 429 (1995)