

Investigation the order of approximants affects in the ITP method for calculating the wave function of the ground state

Neda Beheshti Rad, Vahid Mirzaei Mahmoudabadi, Farideh Shojaei*

Faculty of Physics Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran

Received: 22.12.2020 Final revised: 28.06.2021 Accepted: 03.08.2021

Doi link: [10.22055/JRMBS.2021.17016](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.17016)

Abstract

In order to show the effects of different degrees of expansion of the imaginary time propagation operator on convergence, the imaginary time propagation method is used, for example, for a simple harmonic oscillator. Considering the potential energy, the wave function of the ground state of the system as well as the wave function that is close to the wave function of the ground state of the system can be seen that each time the imaginary time operator is applied, the wave of initial guess function approaches the wave function of the ground state of the system. Examining the different levels of expansion of the operator, it can be seen that the higher the level used, the less repetition of the operations of this operator to reach the wave function of the base state of the system. The Monte Carlo computational method was used to calculate the integrals. Finally, this method has been tested on the hydrogen atom to investigate the physical problem.

Keywords: Schrödinger Equation, Ground State, ITP Method, Imaginary Time Operator, Multi-particle Systems

* Corresponding Author: fshojaei@uk.ac.ir



بررسی تأثیر مرتبه تقریبات در روش انتشارگر زمان موهومی برای محاسبه

تابع موج حالت پایه

ندا بهشتی راد، وحید میرزایی محمودآبادی، فریده شجاعی*

دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران

دریافت: 1399/10/02 ویرایش نهایی: 1400/04/07 پذیرش: 1400/05/12

Doi link: [10.22055/JRMBS.2021.17016](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.17016)

چکیده

به منظور چگونگی تأثیرات مراتب مختلف بسط عملگر انتشار زمان موهومی بر روی همگرایی، روش انتشار زمان موهومی به طور مثال برای نوسانگر هماهنگ ساده استفاده شده است. انتظار می‌رود، که با در نظر گرفتن انرژی پتانسیل، تابع موج حالت پایه سیستم و همچنین تابع موجی که به تابع موج حالت پایه سیستم نزدیک باشد، بتوان به تابع موج حالت پایه دست یافت. قابل مشاهده است که با هر بار اعمال عملگر زمان موهومی تابع موج حدس اولیه به تابع موج حالت پایه سیستم نزدیک می‌شود. در بررسی مراتب مختلف بسط عملگر نیز می‌توان مشاهده کرد که هر چه از مراتب بالاتر استفاده شود، تکرار اعمال این عملگر تا رسیدن به تابع موج حالت پایه سیستم کمتر خواهد بود. برای محاسبه انتگرال‌ها از روش محاسباتی مونته کارلو استفاده شده است. در نهایت برای بررسی مسئله فیزیکی این روش روی اتم هیدروژن امتحان شده است.

کلیدواژگان: معادله شرودینگر، حالت پایه سیستم، روش انتشار زمان موهومی، عملگر زمان موهومی، سیستم‌های بس‌ذره‌ای

مقدمه

نمودن زمان موهومی به جای زمان واقعی در معادله شرودینگر می‌باشد [1]. روش انتشارگر موهومی در چند دهه اخیر مورد توجه دانشمندان در میدان‌های مختلف علوم خصوصاً در فیزیک و ریاضی قرار گرفته است. روش ITP در بیشتر زمینه‌ها مفید واقع شده است. سیو چین و همکاران از روش انتشارگر زمان موهومی برای حل معادله شرودینگر استفاده نموده‌اند [1]. در کار دیگری سیو چین با استفاده از زمان موهومی به حل معادله GP^2 پرداخته است. آنها با حل معادله GP در زمان موهومی خواص حالت پایه میعان را

به طور کلی، پیدا کردن مستقیم تابع موج حالت پایه از هامیلتونین برای یک سیستم کوانتومی کاری بس دشوار است، و تنها برای چند سیستم حل نسبتاً دقیقی برای آن وجود دارد. چند دهه است که، ترفندی ریاضی بر روی معادله شرودینگر انجام شده، به طوری که می‌توان تابع موج حالت پایه و انرژی پایه را با دقت دلخواهی تقریب زد. این ترفند که به عنوان انتشارگر زمان موهومی¹ (ITP) معروف است، شامل جایگزین

* نویسنده مسئول: fshojaei@uk.ac.ir

¹ The Imaginary Time Propagation (ITP)

² Gross-Pitaevskii

تعیین نموده‌اند [2]. لوکو و راسنن با استفاده از بسط الگوریتم انتشارگر زمان موهومی معادله شرو دینگر تک‌ذره‌ای را در دوبعد حل نموده‌اند [3]. در مقاله‌ای دیگر بادرو همکاران با استفاده از انتشارگر زمان موهومی مسئله حل ویژه مقدار معادله شرو دینگر را با استفاده از پتانسیل‌های اصلاح شده و طرح شکافتگی با ضرایب حقیقی مثبت مورد بررسی قرار داده‌اند [4]. گروه‌های تحقیقاتی و محققین بسیاری از این روش در فضای یک‌بعدی، دوبعدی و سه‌بعدی استفاده کردند. روش ITP می‌تواند به‌عنوان مشابه روش‌های توانی که به‌خوبی شناخته شده‌اند در نظر گرفته شود [5]. از روش ITP به‌عنوان یک ابزار مهم برای مطالعه تراز انرژی طیف‌ها و توابعی که به‌شدت برانگیخته شده‌اند در سیستم‌های دوبعدی کوآنتومی می‌توان استفاده کرد، به‌عنوان مثال در مبحث آشوب کوآنتومی¹ از این روش برای بررسی توابع موج دوبعدی برانگیخته و ترازهای انرژی استفاده می‌شود. این روش به‌حل معادلات و فرمول‌بندی بس‌ذره‌ای² کمک می‌کند [6,7]. همچنین روش ITP دوبعدی می‌تواند ابزاری برای حل معادله ویژه‌مقداری باشد. از این ابزار برای بررسی ساختارهای الکتریکی، محاسبات و رسم آن‌ها استفاده می‌شود [8]. با توجه به‌اینکه روش ITP یک روش قوی حل معادله است که به‌عنوان یکی از روش‌های کاربردی در حل معادله شرو دینگر قابل استفاده است. در برخی مطالعات انجام شده این روش، سرعت به‌مراتب بهتری نسبت به‌روش لانکز³ دارد اما با تعداد گام‌های بیشتری به

جواب اصلی نزدیک خواهد شد. مقایسه سرعت همگرایی روی یک سیستم سه‌بعدی تک‌ذره‌ای، تا مرتبه چهار مورد بررسی قرار گرفته‌اند [9]. روش ITP توانایی بسیار خوبی در حل ریاضیاتی معادلاتی دارد که با میدان‌های مغناطیسی سروکار دارند [10]. همچنین توانایی خوبی برای حل مسائل چندبعدی دارد [9]. مزیت در نظر گرفتن زمان موهومی این است که با هر شرایط اولیه، اگر عملگر e^{-tH} مکرراً روی تابع موج حدس اثر داده شود زمانی که $\tau \rightarrow \infty$ آنگاه جواب به‌حالت پایه سیستم همگرا می‌شود. فکر اصلی روش ITP اعمال عملگر e^{-tH} به تابع موج اولیه است به‌گونه‌ای که همپوشانی آن با تابع موج پایه غیرصفر ($\langle E_0 | \psi_0 \rangle \neq 0$) باشد. لازم به‌ذکر است که نماد $\langle E_0 | \psi_0 \rangle$ به‌ترتیب، معرف تابع موج اولیه و تابع موج پایه می‌باشند. اهمیت استفاده از این روش در حل معادله شرو دینگر در فضای سه‌بعدی جایی نمایان می‌شود که بیش از 10^6 نقطه وجود دارد. برای چنین مش⁴‌های بزرگی روش‌های معمول ماتریسی مثل حل معادله ویژه‌مقداری کارایی ندارند، چرا که در کم‌ترین مرتبه‌های ماتریسی برداری ضرب ماتریس‌های $512 \times 512 \times 512$ وجود دارد و بنابراین این روش بسیار کند عمل می‌کند، به‌همین دلیل تعداد زیادی از گروه‌های تحقیقاتی به‌دنبال روش انتشار زمان موهومی و استفاده از آن در حل معادله شرو دینگر هستند [11].

³ Lanxess⁴ Mesh¹ Quantum Chaos² Multiparticle

تئوری

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} |\psi(\tau)\rangle = \hat{H} |\psi(\tau)\rangle, \quad 4$$

در فرمولبندی نظریه مکانیک کوانتومی غیر نسبیتی، وضعیت یک سیستم توسط بردار حالت $|\psi\rangle$ در فضای هیلبرت توصیف می‌شود. در هر لحظه t حالت سیستم توسط $|\psi(t)\rangle$ مشخص می‌گردد. رابطه:

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad 1$$

بیانگر معادله شرودینگر وابسته به زمان بوده و بعد از حل رابطه 1 بردار حالت از رابطه:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle \quad 2$$

به دست می‌آید، که $\hat{U}(t) = e^{-i \int_0^t d\tau \hat{H}(\tau)}$ عملگر گسترش زمان و \hat{H} هامیلتونین کل سیستم است. با فرض این‌که هامیلتونی سیستم مستقل از زمان باشد در فضای هیلبرت می‌توان آن را به دو اپراتور مستقل انرژی جنبشی \hat{T} و پتانسیل \hat{V} به صورت:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}, \quad \hat{T} = -\frac{1}{2} \Delta_N, \quad \hat{V} = V(x), \quad 3$$

تجزیه نمود، که در آن $\Delta_N = \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ عملگر لاپلاس و x بردار موقعیت در فضای بعدی می‌باشند.

روش انتشار زمان موهومی، یک الگوریتم کلی برای حل مسائل ویژه مقدار، از جمله معادله شرودینگر 1 می‌باشد. در روش انتشار زمان موهومی با جانشین نمودن $it \rightarrow \tau$ معادله 1 و با در نظر گرفتن هامیلتونین مستقل از زمان به صورت:

نوشته می‌شود. (در واقع به جای مشتق نسبت به زمان حقیقی، نسبت به زمان موهومی مشتق گرفته شده است مکرر از عملگر $e^{-\tau H}$ و تأثیر عملکرد آن بر روی تابع موج حالت پایه می‌باشد. برای اعمال روش ITP در شبیه‌سازی نیاز به روشی می‌باشد که برای هر حالت دلخواه $|\psi\rangle$ ، عبارت $e^{-\tau H} |\psi\rangle$ را محاسبه نموده و هر حالت بهنجار و همگرایی را بررسی نماید. در نمایش موقعیت عملگر $e^{-\tau V}$ و در نمایش اندازه حرکت عملگر $e^{-\tau T}$ به طور دقیق قابل محاسبه بوده اما محاسبه $e^{-\tau T}$ در نمایش موقعیت نیاز به محاسبات جداگانه‌ای دارد.

محاسبات

برای بررسی تأثیر عملگر $G(\tau) = e^{-\tau H}$ روی $|\psi\rangle$ تقریب‌های متفاوتی ارائه شده است [1]. شکل کلی تقریب‌ها به صورت ترکیب خطی از حاصلضرب عملگرهای $e^{-\tau T}$ و $e^{-\tau V}$ به شکل:

$$\hat{G}(\tau) = e^{-\tau \hat{H}} = \sum_i c_i \prod_j e^{-\tau a_{i,j} \hat{T}} e^{-b_{i,j} \hat{V}} + O(\tau^n) \quad 5$$

می‌باشد، که c_i ، $a_{i,j}$ و $b_{i,j}$ ضرایب ثابت بوده و n مرتبه تقریب برحسب پارامتر τ می‌باشد. شکل کلی این تقریب‌ها در پیوست 1 آورده شده است. رابطه 5 را به صورت طرح‌های مختلفی می‌توان بیان کرد. ساده‌ترین آنها به صورت:

مشخص شده است که i حالت و n بیانگر مرتبه است. در جدول شماره یک نماد TV به طور مثال، به ترتیب قرارگیری T و V در نمای اکسپوننشیل همان گونه که رابطه 5 نشان می دهد، وابسته است، از طرف دیگر در جدول 1، C_1 برحسب پتانسیل مسئله، طبق روابط برگشتی:

$$\hat{C}_0 := \hat{V}, C_{i+1} := [\hat{V}, [\hat{T}, \hat{C}_i]] = \nabla \hat{V} \cdot \nabla \hat{C}_i \quad 8$$

تعریف می شود [1].

در رابطه 8، $[\hat{T}, \hat{C}_i]$ بیانگر جابه جایی دو عملگر می باشد.

$$\begin{aligned} \hat{G}(\tau) &= e^{-\tau \hat{H}} = e^{-\tau \hat{T}} e^{-\tau \hat{V}} + O(\tau^1) \\ &= e^{-\tau \hat{V}} e^{-\tau \hat{T}} + O(\tau^1) \end{aligned} \quad 6$$

بوده و معروف به طرح VT و TV از نوع تقریب مرتبه اول بوده و طرح های VTV و TVT منجر به تقریب مرتبه دوم:

$$\begin{aligned} \hat{G}(\tau) &= e^{-\frac{\tau \hat{T}}{2}} e^{-\tau \hat{V}} e^{-\frac{\tau \hat{T}}{2}} + O(\tau^2) \\ &= e^{-\frac{\tau \hat{V}}{2}} e^{-\tau \hat{T}} e^{-\frac{\tau \hat{V}}{2}} + O(\tau^2) \end{aligned} \quad 7$$

می شود. به همین ترتیب طرح های مرتبه بالاتر را نیز می توان نوشت که این طرح ها تا مرتبه 4 در جدول 1 نشان داده شده اند. به ازاء هر حالت مرتبه ای به صورت

i	۱	۲	۳	۴	۵	۶	۷	۸
n	۱	۱	۲	۲	۴	۴	۴	۴

جدول 1. طرح های مختلف تقریب $G_i(\tau)$

i	طرح	$\hat{G}_i(\tau)$
1	TV	$e^{-\tau \hat{T}} e^{-\tau \hat{V}}$
2	VT	$e^{-\tau \hat{V}} e^{-\tau \hat{T}}$
3	TVT	$e^{-\frac{\tau \hat{T}}{2}} e^{-\tau \hat{V}} e^{-\frac{\tau \hat{T}}{2}}$
4	VTV	$e^{-\frac{\tau \hat{V}}{2}} e^{-\tau \hat{T}} e^{-\frac{\tau \hat{V}}{2}}$
5	VTVCTV	$e^{-\frac{\tau \hat{V}}{6}} e^{-\frac{\tau \hat{T}}{2}} e^{-\frac{2\tau \hat{V}}{3}} e^{-\frac{1}{72}\tau^3 \hat{C}_1} e^{-\frac{\tau \hat{T}}{2}} e^{-\frac{\tau \hat{V}}{6}}$
6	VCTVTV	$e^{-\frac{\tau \hat{V}}{6}} e^{-\frac{1}{144}\tau^3 \hat{C}_1} e^{-\frac{\tau \hat{T}}{2}} e^{-\frac{2\tau \hat{V}}{3}} e^{-\frac{\tau \hat{T}}{2}} e^{-\frac{\tau \hat{V}}{6}} e^{-\frac{1}{144}\tau^3 \hat{C}_1}$
7	VCTVCTV	$e^{-\frac{\tau \hat{V}}{6}} e^{-\frac{1}{432}\tau^3 \hat{C}_1} e^{-\frac{\tau \hat{T}}{2}} e^{-\frac{2\tau \hat{V}}{3}} e^{-\frac{1}{108}\tau^3 \hat{C}_1} e^{-\frac{\tau \hat{T}}{2}} e^{-\frac{\tau \hat{V}}{6}} e^{-\frac{1}{432}\tau^3 \hat{C}_1}$
8	TVCTVCT	$e^{-\frac{(3-\sqrt{3})\tau \hat{T}}{6}} e^{-\frac{\tau \hat{V}}{2}} e^{-\frac{2-\sqrt{3}}{48}\tau^3 \hat{C}_1} e^{-\frac{\tau \hat{T}}{\sqrt{3}}} e^{-\frac{\tau \hat{V}}{2}} e^{-\frac{2+\sqrt{3}}{48}\tau^3 \hat{C}_1} e^{-\frac{(3+\sqrt{3})\tau \hat{T}}{6}}$

استفاده شده، مقایسه گردیده است. لازم به ذکر است که محاسبات بدین صورت انجام شده که با مفهوم روش وردشی سعی بر این بوده است که کمینه انرژی به دست آید و این کار با رسم نمودار انرژی برحسب پارامتر انجام شده است و مقدار پارامتری که به ازای آن انرژی کمینه می‌گردد، به دست آمده است. برای نمونه یکی از محاسبات که برای $G_i(\tau)$ انجام شده است، ذکر می‌گردد. در اولین مرحله، برطبق اصل وردشی در کوآنتوم مکانیک که انرژی هر حالت $|\psi\rangle$ بزرگتر یا مساوی انرژی حالت پایه E_0 می‌باشد، سعی شده است که رابطه:

$$E = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad 11$$

را در روش ITP محاسبه نموده و نمودار $E - E_0$ برحسب τ رسم شود. از روی نمودار مقدار مناسب τ به دست آمده تا در محاسبات بعدی مورد استفاده قرار گرفته شود. در روش ITP طبق رابطه 4 تابع موج به شکل:

$$|\psi(\tau)\rangle = e^{-\tau \hat{H}} |\psi\rangle \quad 12$$

می‌باشد. لذا محاسبات بر اساس رابطه 12 و رابطه:

$$\phi_{i+1}(x) = \hat{G}_j(\tau) \phi_i(x) \quad 13$$

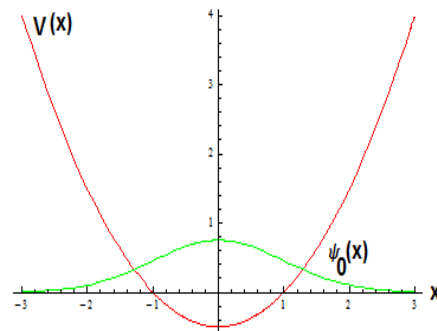
انجام شده و رابطه وردشی به شکل:

$$\langle \phi_{i+1} | e^{-\tau \hat{H}} | \phi_{i+1} \rangle = \langle \hat{G}_j(\tau) \phi_i | e^{-\tau \hat{H}} | \hat{G}_j(\tau) \phi_i \rangle \quad 14$$

برای نشان دادن اثرات تقریب در این مقاله، همگرایی روش ITP روی شبکه یک بعدی شبیه‌سازی شده است. برای اینکار از پتانسیل نوسانگر هماهنگ ساده $V(x) = \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{2}$ استفاده شده است. برای این پتانسیل، تابع آزمون به صورت:

$$\phi_0(x) = \max\{0, 1 - (x - 1)^2\} \quad 9$$

در نظر گرفته شده است. تابع موج حالت پایه برابر با $\psi_0 = \frac{1}{(\pi)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2}}$ می‌باشد. در نمودار 1 شکل پتانسیل و تابع موج حالت پایه رسم شده است.



شکل 1. رسم نمودار پتانسیل و تابع موج حالت پایه

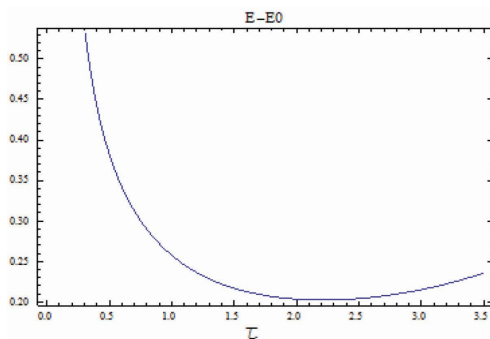
با استفاده از روابط برگشتی 7 برای این پتانسیل مقدار C_1 برابر با:

$$C_0 = \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{2}, C_1 = \nabla V \cdot \nabla V = x^2 \quad 10$$

خواهد شد. برای نشان دادن اینکه چگونه اثرات تقریب روی همگرایی اثر خواهد داشت، روش ITP به صورت عددی شبیه‌سازی می‌شود. برای شبیه‌سازی از روش مونت کارلو استفاده شده است (پیوست 2) و با روشی که از شبکه یک بعدی در کار ژاکوب کوکاک [12]

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | e^{-\tau \hat{H}} | \phi_1 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_3 \\ &\times \phi_0(x) e^{-\tau V(x)} \langle x | e^{-\tau \hat{T}} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-\tau \hat{T}} | x_2 \rangle \\ &\times e^{-\tau V(x_2)} \langle x_2 | e^{-\tau \hat{T}} | x_3 \rangle e^{-\tau V(x_3)} \phi_0(x_3) \end{aligned}$$

نوشته می‌شود. بعد از انجام محاسبات و با توجه به رابطه 11 انرژی $E - E_0$ برحسب پارامتر زمان موهومی τ در شکل 2 رسم شده است.



شکل 2. اختلاف انرژی $E - E_0$ برای حالت

$$\phi_1(x) = \hat{G}_1(\tau) \phi_0(x)$$

همان‌گونه از نمودار مشخص است مقدار مناسب برای زمان موهومی $\tau = 2.2$ می‌باشد. حال در رابطه 13 $j = 1$ و $i = 0$ قرار داده و با انجام محاسبات، به شکل:

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= \langle x | \phi_1 \rangle = \\ \langle x | \hat{G}_1(\tau) | \phi_0 \rangle &= \langle x | e^{-\tau \hat{V}} e^{-\tau \hat{T}} | \phi_0 \rangle \quad 19 \\ &= \langle x | e^{-\tau \hat{V}} e^{-\tau \hat{T}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 | x_1 \rangle \langle x_1 | \phi_0 \rangle \end{aligned}$$

و مرتب کردن جملات و استفاده از رابطه 14 تابع موج به شکل:

نوشته می‌شود. در هر تکرار محاسبه عملگرهای $e^{-\tau \hat{V}}$ و $e^{-\tau \hat{C}_i}$ کار راحتی بوده و برای محاسبه عملگر $e^{-\tau \hat{T}}$ عملگر واحد $\int_{-\infty}^{+\infty} dx | x \rangle \langle x | = I$ به رابطه مورد نظر اعمال شده و از رابطه:

$$\langle x' | e^{-\tau \hat{T}} | x \rangle = \frac{1}{(2\pi\tau)^{1/2}} e^{-\frac{(x'-x)^2}{2\tau}} \quad 15$$

استفاده شده است. در ابتدا با قرار دادن $j = 1$ و $i = 0$ رابطه 14 به صورت:

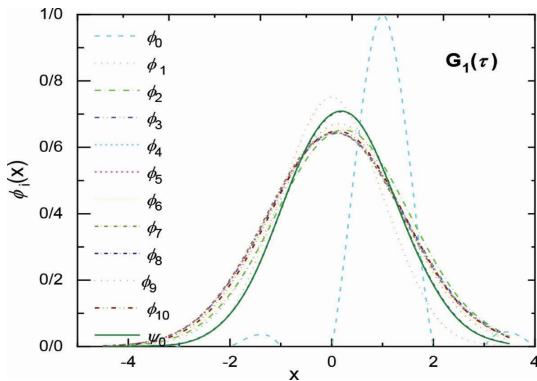
$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | e^{-\tau \hat{H}} | \phi_1 \rangle &= \\ \langle \hat{G}_1(\tau) \phi_0 | e^{-\tau \hat{H}} | \hat{G}_1(\tau) \phi_0 \rangle \quad 16 \end{aligned}$$

نوشته شده که در آن از رابطه 13 نیز استفاده شده و در این مرحله از جدول شماره 1 مقدار $\hat{G}_1(\tau)$ را جانشین نموده و عملگر یکانی بین اپراتور انرژی به صورت:

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | e^{-\tau \hat{H}} | \phi_1 \rangle &= \\ = \langle \phi_0 | e^{-\tau \hat{V}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx | x \rangle \langle x | e^{-\tau \hat{T}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 & \\ \times | x \rangle \langle x_1 | e^{-\tau \hat{V}} e^{-\tau \hat{V}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 | x_2 \rangle \langle x_2 | & \\ \times e^{-\tau \hat{V}} e^{-\tau \hat{V}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_3 | x_3 \rangle \langle x_3 | \phi_0 \rangle & \quad 17 \end{aligned}$$

جانشین می‌گردد، با انجام کمی عملیات رابطه 17 به صورت:

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | e^{-\tau \hat{H}} | \phi_1 \rangle &= \\ \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_3 \langle \phi_0 | x \rangle e^{-\tau V(x)} & \\ \times \langle x | e^{-\tau \hat{T}} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-\tau \hat{T}} | x_2 \rangle e^{-\tau V(x_2)} & \\ \times \langle x_2 | e^{-\tau \hat{T}} | x_3 \rangle e^{-\tau V(x_3)} \langle x_3 | \phi_0 \rangle & \quad 18 \end{aligned}$$

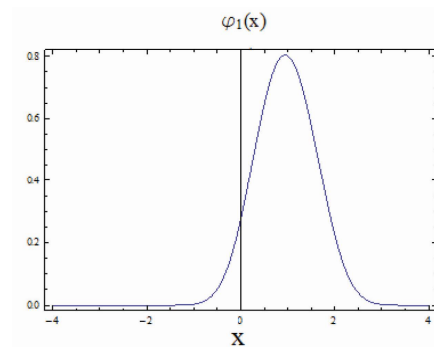


شکل 4. حالات مختلف $\hat{G}_1(\tau)\phi_i(x) = \phi_{i+1}(x)$ برای $\hat{G}_1(\tau)$ و $i = 1, 2, 3, 4, \dots, 9$.

چنانچه در شکل 4 نیز مشخص است هر چه مرتبه تقریب بالاتر می‌رود نمودار تابع موج به دست آمده، به تابع موج واقعی نزدیک‌تر می‌شود. مقایسه همگرایی تابع موج حدس به تابع موج برای عملگر \hat{G}_1 با روش شبکه‌ای و روش مونته‌کارلو در شکل 5 نشان داده شده است.

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 e^{-\tau V(x)} \langle x | e^{-\frac{1}{2}\tau f} | x_1 \rangle \\ &\times \langle x_1 | \phi_0 \rangle \\ \phi_1(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 e^{-\tau V(x)} \frac{1}{(2\pi\tau)^{1/2}} \\ &\times e^{-\frac{(x-x_1)^2}{2\tau}} \phi_0(x_1) \end{aligned} \quad 20$$

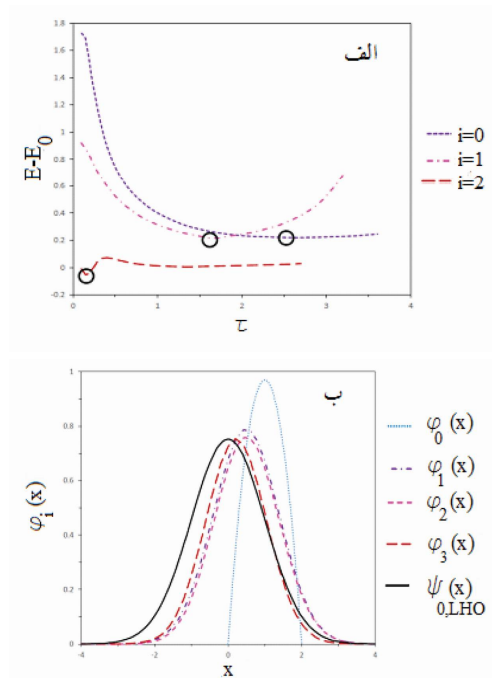
به دست آمده که برحسب x در شکل 3 رسم شده است.



شکل 3. حالت $\phi_1(x) = \hat{G}_1(\tau)\phi_0(x)$ برای $\hat{G}_1(\tau)$.

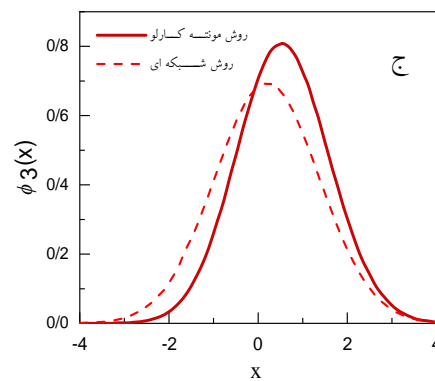
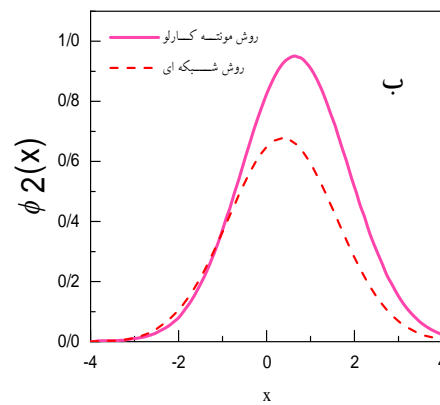
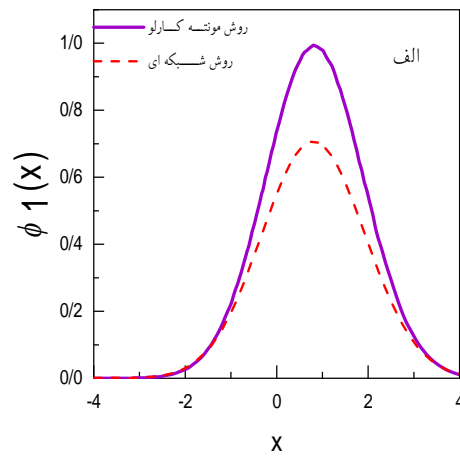
برای بررسی اینکه چند تکرار لازم است تا تابع موج آزمون به تابع موج اصلی نزدیک شود، مجدداً محاسبات به دست آوردن انرژی و مشخص نمودن زمان موهومی مینیموم، تکرار و با قرار دادن $i = 1, 2, 3, 4, \dots, 9, j = 1$ در رابطه 13، تکامل تدریجی تابع موج بعد از هر تکرار برحسب x در شکل 4 رسم شده است.

قابل مشاهده است که روش مونته‌کارلو به مراتب از روش شبکه‌ای بهتر است چراکه سرعت همگرایی به تابع موج اصلی سیستم بیشتر است. هرچه از مراتب بالاتر بسط عملگر استفاده شود تابع موج حدس اولیه با تکرار اعمال کمتری به تابع موج اولیه نزدیک خواهد شد. برای نشان دادن این موضوع محاسبات برای $z = 6$ انجام و نمودارها در شکل 6 نشان داده شده است. شکل الف نمودار $E - E_0$ بر حسب τ و شکل ب همگرایی تابع موج برای عملگر \hat{G}_6 را نشان می‌دهد.



شکل 6. الف: نمودار $E - E_0$ بر حسب τ ; ب: نمودار تابع موج بر حسب x برای $z = 6$ و $i = 0, 1, 2$

مقایسه همگرایی تابع موج حدس به تابع موج برای عملگر \hat{G}_6 با روش شبکه‌ای و روش مونته‌کارلو در شکل 7 نشان داده شده است.



شکل 5. مقایسه تابع موج محاسبه شده به روش شبکه‌ای و روش مونته‌کارلو الف: برای حالت $i = 0, z = 1$ ب: برای حالت $i = 1, z = 1$ ج: برای حالت $i = 2, z = 1$

واگرایی بردار حالت، در مبدأ $r=0$ مشکل ایجاد خواهد کرد که نمی‌تواند نرمالیزه شده و خارج از فضای هیلبرت خواهد بود. از آنجا که شکل کلی تقریب شامل عملگرهای $e^{-\tau\hat{C}_i}$ و $e^{-\tau\hat{V}}$ و $e^{-\tau\hat{C}_i}$ بوده و ماهیت عملگرهای $e^{-\tau\hat{C}_i}$ به این صورت است که آنها تنها تقریب‌های $2i+1$ ام یا بالاتر را بهبود می‌بخشند، لذا با توجه به شکل پتانسیل کولمبی و تعریف

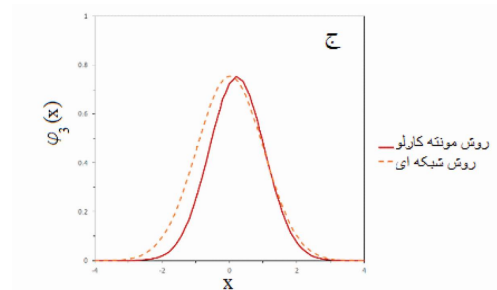
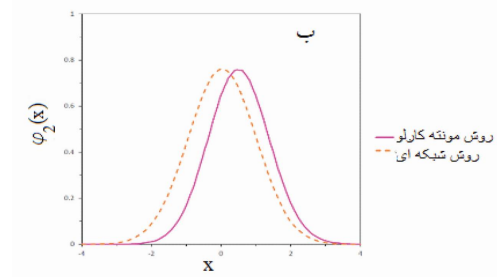
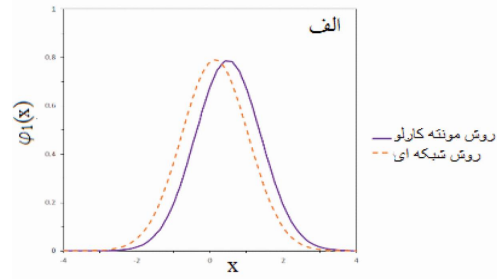
$$\hat{C}_0 := \hat{V}, \hat{C}_{i+1} := [\hat{V}, [\hat{T}, \hat{C}_i]] = \nabla \nabla \cdot \nabla C_i \quad 21$$

برای عملگر \hat{C}_i برای پتانسیل کولمبی ترکیبی از اپراتورهای $e^{-\tau\hat{C}_i}$ و $e^{-\tau\hat{V}}$ از بینهایت بودن در مبدأ جلوگیری خواهد کرد و یک بردار حالت نرمال به دست آورده می‌شود. برای تابع موج حدسی اولیه از رابطه

$$\varphi_0(x) = \alpha e^{-\gamma(r-\beta)^2}, \quad 22$$

$$\alpha = 0.0483, \gamma = 0.347, \beta = 0.25$$

استفاده شده است. بعد از انجام محاسباتی مشابه با نوسانگر هارمونیک، مشخص شد که به دلیل خاصیت منحصر به فرد بودن پتانسیل کولمبی بایستی از تقریب مناسبی استفاده کرد. بنابراین با توجه به ماهیت عملگرهای $e^{-\tau\hat{C}_i}$ که به پتانسیل وابسته‌اند، با استفاده از تقریب چهارم (TVCTVCT) با $\hat{G}_8(\tau)$ جواب مناسبی برای اتم هیدروژن مشاهده گردید. با استفاده از رابطه 10 برای حالات متفاوت و با انجام محاسبات رابطه‌ای برای انرژی به دست آورده شد و نمودار $E-E_0$ برحسب τ را رسم گردید و از روی آن



شکل 7. مقایسه تابع موج محاسبه شده به روش شبکه‌ای و روش مونت کارلو برای حالت: $j=6$ الف: $i=0$ ب: $i=1$ ج: $i=2$.

برای داشتن یک دید فیزیکی از بحث مورد نظر و با توجه به اینکه در حل مسائل پراکندگی تابع موج سیستم، نقش کلیدی را بازی می‌کند، لذا مطالب ارائه شده بر روی اتم هیدروژن برای به دست آوردن تابع موج پایه، اعمال شده است. اتم هیدروژن به دلیل داشتن پتانسیل کولمبی بلند برد دارای شرایط ویژه‌ای بوده و تکنیکی¹ بودن آن، مسئله را منحصر به فرد کرده لذا در این خصوص بایستی دقت بیشتری را مد نظر قرار داد. برای پتانسیل کولمبی عملگر $e^{-\tau\hat{V}}$ به دلیل خاصیت

¹ Singularity

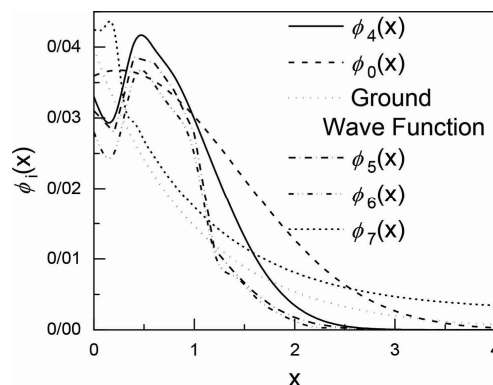
بحث و نتیجه گیری

همانطور که مشاهده شد روش انتشار زمان موهومی، یکی از بهترین و در عین حال سریعترین روشهای مبتنی بر تکرار سری وار عملیات ریاضی، برای رسیدن به حالت پایه تابع موج یک سیستم می باشد. گرچه پیچیدگیهای ریاضی این روش ممکن است کمی زمان بر باشد اما پس از پیاده سازی جواب مطلوب را خواهد داد. برای پیاده سازی ریاضی این روش بایستی چندین مسئله انتگرالی مورد بررسی و حل قرار گیرند. برای حل انتگرالهای موجود در راهبرد ریاضی روش انتشار زمان موهومی از روش انتگرال گیری مبتنی بر اعداد تصادفی استفاده می شود. روش انتگرال گیری مونته کارلو ساده به راحتی پاسخهای مورد نظر را تأمین می کند. روش مونته کارلو در مقایسه با روشهای قدیمی دیگر از جمله روش شبکه ای، سرعت دستیابی به مراتب بالاتر و طبعاً دقت بالاتری دارد. با افزایش ابعاد تعداد محاسبات در روشهای انتگرال گیری معمول به صورت توانی با ابعاد افزایش پیدا می کنند؛ به عنوان مثال اگر برای تخمین انتگرالی با خطای مشخص در یک بعد نیاز به 100 محاسبه است آنگاه اگر ابعاد مسئله دو و سه بعد گردد تعداد محاسبات به ترتیب 10000 و 1000000 خواهد بود. در روش انتگرال گیری مونته کارلو افزایش محاسبات با ابعاد به صورت خطی افزایش می یابد؛ برای مورد مطرح شده با افزایش ابعاد مسئله مورد بررسی از یک به دو و سه محاسبات مورد نیاز از 100 به ترتیب به 200 و 300 افزایش خواهد یافت.

مقدار T_{\min} به دست آورده شد. برای محاسبه تابع موج از رابطه

$$|\varphi_{i+1}\rangle = \hat{G}_8(\tau) |\varphi_i\rangle \quad 23$$

استفاده و با انجام محاسباتی مشابه حالت نوسانگر، روابطی برای توابع موج در حالات مختلف به دست آمد و نمودار توابع $\varphi_3(x)$ ، $\varphi_6(x)$ و $\varphi_7(x)$ به دست آمده، تابع موج حالت پایه و تابع موج حدسی $\varphi_0(x)$ در شکل 8 نمایش داده شده است.



شکل 8. مقایسه نمودار توابع مختلف برای اتم هیدروژن، برای عملگر زمانی $\hat{G}_8(\tau)$ خط ممند $\varphi_4(x)$ ، خط چین تابع موج حدسی $\varphi_0(x)$ ، نقطه چین تابع موج حالت پایه، خط نقطه $\varphi_3(x)$ ، خط دونقطه $\varphi_6(x)$ ، خط کوتاه $\varphi_7(x)$.

به دلیل خاصیت پتانسیل کولمبی در نزدیکی مبدأ منحنیها رفتار متفاوتی از خود نشان می دهند. هر چه مرتبه تقریبها بالا می رود این رفتار کمرنگ تر می شود منحنی $\varphi_7(x)$ رفتاری شبیه به تابع موج حالت پایه دارد اما هنوز در نزدیکیهای مبدأ کمی رفتار متفاوتی نسبت به حالت پایه از خود نشان می دهد.

پیوست 1

4- اگر معادلات حل شد و متغیر آزاد دیگری باقی ماند مرحله دوم باید برای $(n+1)$ تکرار شود.

تقریب مرتبه اول با شماتیک‌های TV و VT به صورت

$$\begin{aligned} e^{-\tau \hat{H}} &= e^{-\tau \hat{T}} e^{-\tau \hat{V}} + O(\tau^1) \\ &= e^{-\tau \hat{V}} e^{-\tau \hat{T}} + O(\tau^1) \end{aligned} \quad 5$$

خواهد بود که به آن جداسازی لی² یا تجزیه تروت³ گفته می‌شود.

شماتیک‌های TVT و VTV به تقریب مرتبه دوم

$$\begin{aligned} e^{-\tau \hat{H}} &= e^{-\frac{\tau \hat{T}}{2}} e^{-\tau \hat{V}} e^{-\frac{\tau \hat{T}}{2}} + O(\tau^2) \\ &= e^{-\frac{\tau \hat{V}}{2}} e^{-\tau \hat{T}} e^{-\frac{\tau \hat{V}}{2}} + O(\tau^2) \end{aligned} \quad 6$$

منجر می‌شود. اگر ضرایب جهت جلوگیری از بی‌نهایت‌ها به مقادیر مثبت و حقیقی محدود شوند، می‌توان نشان داد که ضرب عملگرها فقط تا مرتبه دوم قابل تعریف هستند. این یک قرارداد برای نتایج حاصل از مراحل ذکر شده است. شماتیک‌های بالاتر ضرایبی منفی و مختلط را ایجاد می‌کنند. به عنوان مثال شماتیک VT²VTV مربوط به تقریب مرتبه سوم رابطه 3 به صورت

$$e^{-\tau \hat{H}} = e^{-\tau b \hat{V}} e^{-\tau a \hat{T}} e^{-\tau b \hat{V}} e^{-\tau a \hat{T}} e^{-\tau b \hat{V}} + O(\tau^3) \quad 7$$

با ضرایبی مختلط به صورت

$$\begin{aligned} b_1 = b_3 &= \frac{1}{12}(3 \pm \sqrt{3}i), \\ a_1 = a_2 &= \frac{1}{6}(3 \pm \sqrt{3}i), \quad b_2 = \frac{1}{2} \end{aligned} \quad 8$$

ایجاد می‌کند.

برای تقریب‌های مراتب بالاتر این شرط وجود دارد که $(\text{Re}(a_i) \geq 0)$ و $(\text{Re}(b_i) \geq 0)$ اگر چه رایج‌ترین و ساده‌ترین بسط به صورت ضرایب تقریب تک‌ضرب

تقریب بدون گرادیان¹

شکل کلی و عمومی تقریب‌ها گاهی به عنوان بسط

چند جمله‌ای از عملگرها به صورت

$$e^{-\tau \hat{H}} = \sum_i c_i \prod_j e^{-\tau a_{i,j} \hat{T}} e^{-\tau b_{i,j} \hat{V}} + O(\tau^n) \quad 1$$

نشان داده می‌شود به طوری که c_i ، $a_{i,j}$ و $b_{i,j}$ ثابت‌های

غیر قابل تغییر هستند و n مرتبه تقریب برای پارامتر τ است. برای راحتی کار از تقریب دیگری، که

به تقریب تک‌ضربی معروف است و به شکل

$$e^{-\tau \hat{H}} = \prod_i e^{-\tau a_i \hat{T}} e^{-\tau b_i \hat{V}} + O(\tau^n) \quad 2$$

می‌باشد، استفاده می‌شود. فرآیند به دست آوردن a_i و

b_i دارای چهار مرحله بوده که در ادامه آورده می‌شوند.

1- ضرب عملگرها برحسب نمادگذاری اینشتین به صورت

$$TV \psi = -V_{,i} \psi_{,i} - \frac{1}{2} V_{,ii} \psi_{,ii} \quad 3$$

نمایش داده می‌شود. $(V_{,i})$ نمادگذاری اینشتین می‌باشد.

2- تقریب 3 برحسب τ و ضرب عملگرها به صورت

$$e^{-a \hat{T}} e^{-b \hat{V}} = \hat{1} - a_1 \tau \hat{T} - b_1 \tau \hat{V} + O(\tau^1) \quad 4$$

بسط داده می‌شود.

3- به کمک ضرب عملگرها برحسب نمادگذاری

اینشتین و بسط عملگر در مرحله 2 و مقایسه کردن

بخش به بخش دو سمت معادله، ضرایب به دست

خواهند آمد.

³ Trotter Decomposition

¹ Approximations Without Gradient

² Lie Splitting

تخمین عدد پی می‌باشد. امروزه در ریاضیات، عدد پی را با دقت بسیار زیاد معین و در محاسبات دقیق استفاده می‌کنند. برای تخمین عدد پی به روش مونته کارلو، یک عدد تصادفی در دامنه صفر و یک به عنوان محور افقی (x) و یک عدد تصادفی دیگر در دامنه صفر و یک به عنوان محور عمودی (y) انتخاب شده آنگاه بردار حاصل از جمع این دو بردار به عنوان $(x^2 + y^2)^{\frac{1}{2}}$ معین می‌شود. اگر طول بردار حاصل کمتر یا مساوی با واحد باشد، نقطه رأس این بردار داخل دایره یا روی محیط آن به شعاع واحد قرار می‌گیرد. در غیر این صورت، خارج آن خواهد بود. در حالت قرار گرفتن نقطه رأس بردار داخل دایره، این عمل به عنوان یک ضربه موفق یا رویداد محتمل در نظر گرفته می‌شود، در غیر این حالت به شکست اطلاق می‌شود. در حالتی که این عمل بارها تکرار گردد، نسبت تعداد موفقیت‌ها به تعداد کل تکرارها معادل نسبت سطح ربع دایره‌ای به شعاع واحد به سطح مربعی به طول واحد است که معیار دقیقی از عدد پی خواهد بود. فرایند شبیه‌سازی مونته کارلو کمابیش مشابه با مثال ذکر شده است. ابتدا یک عدد تصادفی تولید شده و سپس احتمال انجام یک رخداد با مقدار عدد تصادفی تولید شده مقایسه می‌شود. در حالتی که عدد تولید شده، معیار احتمال را برآورده کند، یک فرایند یا مجموعه‌ای از فرایندها یا تحولات رخ می‌دهد. این روال می‌تواند چند بار تکرار شود و به‌ازای هر تکرار یک خروجی قابل اندازه‌گیری تولید شود. در نهایت مجموعه آزمایش‌ها یا نتایج خروجی تحت پردازش آماری قرار گرفته می‌شود.

است اما مطالعاتی بر روی ضرب‌های چندگانه نیز انجام شده است. شنگ¹ با مطالعه بر روی ضرب‌های چندگانه به این نتیجه رسید که اگر ضرایب $a_{i,j}$ ، $b_{i,j}$ و c_i مثبت در نظر گرفته شوند نهایتاً تقریب مرتبه دوم به دست خواهد آمد [13].

پیوست 2

مونته کارلو

روش محاسباتی در این مقاله برای حل انتگرال‌های ایجاد شده در روش مدنظر ITP، روش مونته کارلو بوده است. روش مونته کارلو یک طبقه از الگوریتم‌های محاسبه‌گر می‌باشد که برای محاسبه نتایج خود بر نمونه‌گیری‌های تکرار شونده تصادفی اتکا می‌کند. روش‌های مونته کارلو اغلب برای انجام شبیه‌سازی یک سامانه ریاضیاتی یا فیزیکی استفاده می‌شوند. به دلیل اتکای آن‌ها بر محاسبات تکراری و اعداد تصادفی یا تصادفی کاذب، اغلب به‌گونه‌ای تنظیم می‌شوند که توسط رایانه اجرا شوند. گرایش به‌استفاده از روش‌های مونته کارلو زمانی بیشتر می‌شود که محاسبه پاسخ دقیق با کمک الگوریتم‌های قطعی ناممکن یا ناموجه باشد. روش‌های شبیه‌سازی مونته کارلو مخصوصاً در مطالعه سیستم‌هایی که در آن تعداد زیادی متغیر با درجه آزادی‌های دوبه‌دو مرتبط وجود دارد مفید است، این روش‌ها به‌طور گسترده‌ای در ریاضیات مورد استفاده قرار می‌گیرند. یک نمونه استفاده سستی کاربرد این روش‌ها در برآورد انتگرال‌های معین به‌خصوص انتگرال‌های چند بعدی با محدوده‌های مرزی پیچیده است. ساده‌ترین مثال برای درک روش مونته کارلو

¹ Sheng

مرجع‌ها

- [7] P. Luukko, Spectral analysis and quantum chaos in two dimensional nanostructures, *The University of Jyväskylä*, Thesis (2015). <http://urn.fi/URN:ISBN:978-951-39-6376-7>
- [8] L. Lehtovaara, J. Toivanen, & J. Eloranta, Solution of time-independent Schrödinger equation by the imaginary time propagation method, *Journal of Computational Physics* **221** (2007) 148-157. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2006.06.006>
- [9] R.M. Wilcox, Exponential operators and parameter differentiation in quantum physics, *Journal of Mathematical Physics* **8** (1967) 962-982. <https://doi.org/10.1063/1.1705306>
- [10] P.J.J. Luukko, E. Räsänen, Imaginary time propagation code for large-scale two-dimensional eigenvalue problems in magnetic fields, *Computer Physics Communications* **184** (2013) 769-776. <https://www.researchgate.net/publication/256688588>
- [11] M.D. Feit, J.A. Jr. Fleck, A. Steiger, Solution of the Schrödinger Equation by a Spectral Method, *Journal of Computational Physics* **47** 3 (1982) 412-433. [https://doi.org/10.1016/00219991\(82\)90091-2](https://doi.org/10.1016/00219991(82)90091-2)
- [12] J. Kocák, A new method for the solution of the Schrödinger equation, *Department of Physical and Macromolecular Chemistry*, Master Thesis (2017).
- [13] Q. Sheng, Solving linear partial differential equations by exponential splitting, *IMA Journal of Numerical Analysis* **9** 2 (1989) 199-212. <https://doi.org/10.1093/imanum/9.2.199>
- [1] S.A. Chin, S. Janecek, E. Krotscheck, Any order imaginary time propagation method for solving the Schrödinger equation, *Chemical Physics Letters* **470** (2019) 342-346. [doi:10.1016/j.cplett.2009.01.068](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2009.01.068).
- [2] S.A. Chin, E. Krotscheck, Fourth-Order Algorithms for Solving the Imaginary Time Gross-Pitaevskii Equation in a Rotating Anisotropic Trap, *Physical Review E Statistical Nonlinear and Soft Matter Physics* **72** (2005) 036705. [doi:10.1103/PhysRevE.72.036705](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.72.036705)
- [3] P.J.J. Luukko, E. Rasanen, Imaginary time propagation code for large-scale two-dimensional eigenvalue problems in magnetic fields, *Computer Physics Communications* **184** (2013) 769-776. [doi:10.1016/j.cpc.2012.09.029](https://doi.org/10.1016/j.cpc.2012.09.029)
- [4] P. Bader, S. Blanes, F. Casas, Solving the Schrodinger eigenvalue problem by the imaginary time propagation technique using splitting methods with complex coefficients, *The Journal of Chemical Physics* **139** (2013) 124117. <https://doi.org/10.1063/1.4821126>
- [5] M.J. Panza, Application of Power Method and Dominant Eigenvector /Eigenvalue Concept for Approximate Eigenspace Solutions to Mechanical Engineering Algebraic Systems, *American Journal of Mechanical Engineering* **6** (2018) 98-113. <http://dx.doi.org/10.12691/ajme-6-3-3>
- [6] O. Juillet. Ph. Chomaz, Exact Stochastic Mean-Field Approach to the Fermionic Many-Body Problem, *Physical Review Letters* **88** (2002) 142503. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.142503>