文章编号: 1007 －4627(2002)增刊 －0138 －03

强场物理中定态 Schrödinger 方程的辛算法y

刘学深, 祁月盈, 刘晓艳, 丁培柱, 周忠源
(吉林大学原子分子物理研究所, 吉林 长春 130023)

摘 要: 简述了一维定态 Schrödinger 方程的辛形式、求解本征值问题的辛-矩阵法和辛-打靶法及在充分远空间计算线性无关解的保 Wronskian 算法.

关 键 词: 定态 Schrödinger 方程; 分立态; 辛-打靶法; 保 Wronskian
中图分类号: O562 文献标识码: A

1 引言

研究强场物理经常遇到充分远空间上的一维定态 Schrödinger 方程

$$H\psi = E\psi,\quad H = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + V(x), \tag{1}$$

譬如计算强场中一维模型原子的电离几率需要求解方程(1)具有无穷边界条件

$$\psi(-\infty) = 0,\quad \psi(+\infty) = 0 \tag{2}$$

的本征值问题[1]. 令 $\psi' = d\psi/dx = \varphi$, $B(x) = 2(E - V(x))$, 方程(1)可写成

$$\left|\begin{array}{l}\varphi' = -B(x)\psi,\\ \psi' = \varphi,\end{array}\right. \quad 或 \quad z' = G(x)z,$$

$$z = \begin{vmatrix}\varphi\\ \psi\end{vmatrix},\quad G(x) = \begin{vmatrix}0 & -B(x)\\ 1 & 0\end{vmatrix}. \tag{3}$$

容易验证, $G(x)$ 是无穷小辛矩阵[2], (3)式是以 φ 和 ψ 为正则动量和正则坐标 Hamiltonian $H(\varphi,\psi) = \frac{1}{2}\varphi^2 + \frac{1}{2}B(x)\psi^2$ 的正则方程; 它的解从一个空间点 x_1 到另一个空间点 x_2 是一个辛变换 $g_H^{x_1 x_2} = \exp\left(\int_{x_1}^{x_2} G(\xi)d\xi\right): z(x_1) \to z(x_2) = g_H^{x_1 x_2} z(x_1)$. 在这种意义下, 量子系统的空间分布是辛的, 辛算法是求解定态 Schrödinger 方程合理的数值方法.

2 本征值问题的辛算法

将 x 看作“时间”, (3)式是 Hamiltonian 显含时间的正则方程, 应采用显含时间的辛格式, 譬如 2 阶显式辛格式[3] ($B^{n+1/2} = B(x_n + h/2)$):

$$y = \varphi^n,\qquad x = \psi^n + \frac{1}{2}hy,$$

$$\varphi^{n+1} = y - hB^{n+1/2}x,\quad \psi^{n+1} = x + \frac{1}{2}h\varphi^{n+1}. \tag{4}$$

辛-矩阵法 象通常那样在空间充分远处作截断, 将无穷空间上的本征值问题(1)和(2)式转化成具有边界条件

$$\psi(a) = 0,\quad \psi(b) = 0 \tag{5}$$

的有界空间本征值问题. 取充分大正整数 N 将 $[a, b]$ 等分, 记 $h = (b-a)/N$, $x_k = a + kh$, 在格式(4)中, 消去 φ^n 和 φ^{n+1}, 得到

$$-\psi^{n-1} + \left|2 - 2h^2\left|E - \frac{V^{n-1+1/2} + V^{n+1/2}}{2}\right|\right|\psi^n - \psi^{n+1} = 0,\ (n = 1, 2, \Lambda, N-1) \tag{6}$$

其中 $V^{n-1+1/2} = V(x_{n-1} + h/2)$, $V^{n+1/2} = V(x_n + h/2)$, 利用(6)式可将(1), (5)式离散成带状矩阵的本征值问题, 采用常用的方法即可求得本征值和相应的本征函数.

辛-打靶法 基于物理考虑, 取定本征值的一个下界 E_{min}, 再取充分小 $\Delta E > 0$, 记 $E^j = E_{min} + j\Delta E$. 将 E^j 作为试探值代入定态 Schrödinger 方程(1), 取初值

$$\psi(a) = 0,\qquad \varphi(a) = \alpha, \tag{7}$$

y 收稿日期: 2002 - 03 - 05; 修改日期: 2002 - 05 - 27
* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目; 国家重点基础研究专项经费资助项目(G1999032804)
作者简介: 刘学深(1967-), 男(汉族), 江西南康人, 讲师, 从事计算原子与分子物理研究.

α 为任意非零实数. 应用 2 阶显式辛格式(4) 计算初值问题(3) 和(7) 式的解，调整试探值(譬如采用二分法) 使算得的 $\phi(b)=0$，此时的试探值 Š 与 $\phi^0=0$，ϕ^1，L，ϕ^{N-1}，$\phi^N=0$ 就是近似本征值与相应的本征函数(可进一步归一化).

我们曾采用辛-矩阵法和辛-打靶法计算了谐振子、双势阱谐振子和氢原子径向方程的本征值问题. 因为保持了量子系统的空间辛性质，得到了很好的结果[4]. 计算过程说明，辛-打靶法所需存储量和计算时间远少于辛-矩阵法，并且算得的本征值单调地趋于精确值. 表 1 和表 2 是辛-打靶法算得的一维谐振子($H=-\frac{1}{2}\nabla^2+\frac{1}{2}x^2$) 和氢原子径向方程的能量本征值.

表 **1**　用 **2** 阶辛-打靶法算得的一维谐振子能量本征值

N	E_0	E_1	E_2	E_3	E_4
1 000	0.499 996	1.499 981	2.499 950	3.499 905	4.499 845
2 000	0.499 999	1.499 995	2.499 987	3.499 976	4.499 961
3 000	0.499 999	1.499 997	2.499 994	3.499 989	4.499 982
4 000	0.499 999	1.499 998	2.499 997	3.499 994	4.499 990
5 000	0.499 999	1.499 999	2.499 998	3.499 996	4.499 994
精确解	0.500 000	1.500 000	2.500 000	3.500 000	4.500 000

表 **2**　用 **4** 阶显式辛格式算得的氢原子径向方程的能量本征值

N	E_1	E_2	E_3
1 000	- 5.019 41- 01	- 1.252 36- 01	- 5.562 51- 02
2 000	- 5.006 23- 01	- 1.250 76- 01	- 5.557 81- 02
3 000	- 5.003 11- 01	- 1.250 38- 01	- 5.556 68- 02
4 000	- 5.001 89- 01	- 1.250 23- 01	- 5.556 24- 02
5 000	- 5.001 27- 0	- 1.250 15- 01	- 5.556 01- 02
精确解	- 5.000 00- 01	- 1.250 00- 01	- 5.555 56- 02

虽然辛-打靶法在计算本征值时精度很高，但算得的波函数在右边界附近误差较大，不能正确描述束缚态波函数的行为. 因此采用改进辛-打靶法.

在$[a,b]$中间任取一点 $x=x_c(a<x_c<b)$；计算时分别从左边界和从右边界算至点 $x=x_c$，此时左边界和右边界分别被看作是初始点. 改进辛-打靶法可以有：

$$c_1\begin{vmatrix}\varphi_L(a)\\ \phi_L(a)\end{vmatrix}\Rightarrow c_1\begin{vmatrix}\varphi_L(x_c)\\ \phi_L(x_c)\end{vmatrix}$$

$$=c_2\begin{vmatrix}\varphi_R(x_c)\\ \phi_R(x_c)\end{vmatrix}\Leftarrow c_2\begin{vmatrix}\varphi_R(b)\\ \phi_R(b)\end{vmatrix}.$$

图 1 是用改进辛-打靶法算得的一维模型氢原子取软核势 $V(x)=-1/\sqrt{x^2+2}$的分立态：基态和第一、二激发态. 这些分立态可应用于计算强激光场中一维模型氢原子的电离几率[1].

我们已建立了 2 维辛-打靶法，正在探索 $n\geqslant 3$ 维的辛-打靶法.

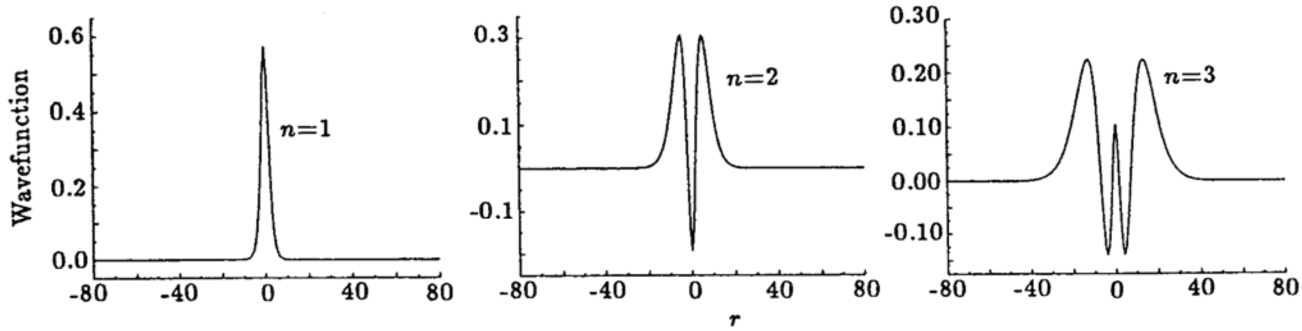

图 1　氢原子基态和第一、二激发态的波函数

3 强场模型的保 Wronskian 算法

1998 年 Gibson 等[5]就一个强场一维模型问题

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\phi}{dx^2}+(V(x)-Fx)\phi=\lambda\phi, \qquad (8)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\phi(x)|^2dx=1 \qquad (9)$$

提出一种很精巧的解法，需要求定态 Schrödinger 方程(8)的两个线性无关解 ϕ_1 和 ϕ_2，分别满足初值

$$\phi_1(0)=1, \quad \phi_1'(0)=0$$

和

$$\phi_2(0)=0, \quad \phi_2'(0)=1 \qquad (10)$$

为此计算中需保持 Wronskian 守恒，$W(\phi_1,\ \phi_2)=\begin{vmatrix}\phi_1 & \phi_2\\ \phi_1' & \phi_2'\end{vmatrix}=\phi_1\phi_2'-\phi_1'\phi_2=1$，这既保证了 ϕ_1 与 ϕ_2 线性无关，也实现了连续态波函数的局部归一化. 将定态 Schrödinger 方程(8)写成正则方程(3)的形式，此时 $B(x)=2(\lambda-V(x)+Fx)$. 很明显，在任一点 x，Wronskian 恰好是辛积[2] $W(\phi_1,\ \phi_2)=\phi_1\phi_2'-\phi_1'\phi_2=\phi_1\varphi_2-\varphi_1\phi_2=<z_1,\ z_2>$，辛格式保持辛积守恒，所以辛格式给出保 Wronskian 守恒算法. 我们采用 2 阶显式辛格式(4)和 4 阶 R-K 法计算了 Gibson 的强场一维模型问题(8)和(9)式，$V(x)=-1/\sqrt{x^2+2}$. 图 2 是算得的 Wronskian. 从中看出，4 阶 R-K 法算得的 Wronskian 逐渐变大，至 27 个原子单位已面目全非. 但 2 阶辛格式计算到 200 个原子单位仍保持 Wronskian 守恒.

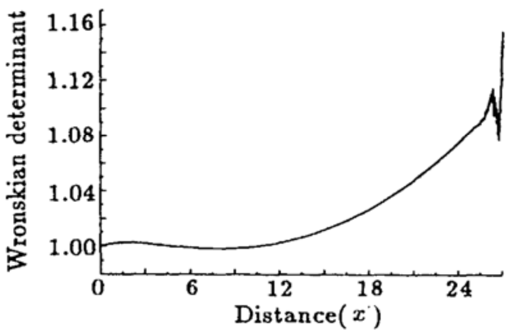

图 2 (a) 4 阶 R-K 方法

参 考 文 献:

[1] 刘晓艳. 强激光与原子相互作用的保结构算法[D]. 长春: 吉林大学原子分子所, 2001.

[2] Feng K, Wu H M, Qin M Z. Symplectic Schemes for Linear Hamiltonian Canonical System [J]. J Comput Math, 1990, **8**(4): 371.

[3] 石爱民, 吴承埙, 周忠源 等. 时间相关外场中量子系统时间演化的辛格式[J]. 计算物理, 1998, **15**(2): 153.

[4] 刘学深. 几个原子分子物理问题的辛算法[D]. 长春: 吉林大学原子分子所, 2001.

[5] Gibson G N, Dunne G, Bergquist K J. Tunneling Ionization Rates from Arbitrary Potential Wells[J]. Phys Rev Lett, 1998, **81**(13): 2 663.

Symplectic Algorithm for Time-independent Schrödinger Equation in the Strong Field*

LIU Xue-shen, QI Yue-ying, LIU Xiao-yan, DING Pei-zhu, ZHOU Zhong-yuan

(*Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun* 130023, *China*)

Abstract: In this paper we have described the symplectic form for 1-dimensional time-independent Schrödinger equation and both the symplectic scheme-matrix method and the symplectic scheme-shooting method for solving eigenvalue problem. The Wronskian-preserving algorithm for computing linear independent solutions in the outmost space is also reported.

Key words: time-independent Schrödinger equation; the symplectic scheme-shooting method; discrete state; Wronskian-preserving algorithm

* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China; China Ministry of Science and Technology under Contract (G1999032804)