

РЕШЕНИЕ ДИСКРЕТНОГО НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ  
ШРЕДИНГЕРА С ЛОВУШКОЙ© 2020 г. В. Н. Лихачев<sup>1</sup>, Г. А. Виноградов<sup>1</sup> \*, Н. С. Эрхман<sup>1</sup><sup>1</sup>Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Москва, Россия

\*E-mail: gvin@deom.chph.ras.ru

Поступила в редакцию 19.06.2019;  
после доработки 17.10.2019;  
принята в печать 21.10.2019

Волновую функцию и энергию основного состояния для дискретного нелинейного уравнения Шредингера с ловушкой можно найти численно с помощью итерационного процесса. Однако этот подход не всегда дает сходящийся результат. Предложен функционал, не являющийся функционалом энергии, минимум которого всегда дает основное состояние рассматриваемой системы.

**Ключевые слова:** дискретное нелинейное уравнение Шредингера, приближение сильной связи.

**DOI:** 10.31857/S0207401X20060060

## ВВЕДЕНИЕ

Континуальное нелинейное уравнение Шредингера и его модификации имеют широкое применение для описания различных явлений: распространения света в нелинейных оптических средах и волноводах, давидовских солитонов в биологических системах и некоторых других [1–4]. У этого уравнения есть его решеточный аналог – дискретное нелинейное уравнение Шредингера (ДНУШ). Это уравнение и его варианты также имеют обширные применения в решеточных моделях для анализа различных процессов; ДНУШ применимо в тех же областях, где и континуальное уравнение. Оно относительно легко решается численными методами, и вследствие этого имеются многочисленные примеры использования этого уравнения [5–12].

Дискретное нелинейное уравнение Шредингера является частным случаем более общего уравнения – дискретного уравнения с самозахватом [13]:

$$i \frac{d\Psi}{dt} = U |\Psi_j|^2 \Psi_j + \beta \sum_k m_{jk} \Psi_k,$$

где  $m_{jk}$  есть матрица связи. Если решетка короткая ( $N \leq 4$ ), то эти уравнения можно решить точно. Для более длинных систем решение может быть получено только численными методами. Если матрица  $m_{jk}$  в приближении сильной связи определяет взаимодействие только ближайших соседних узлов, т.е.  $k = j \pm 1$ , то это уравнение становится точно интегрируемым [14]. Для трансляционного инвариантного ДНУШ получено стационарное решение

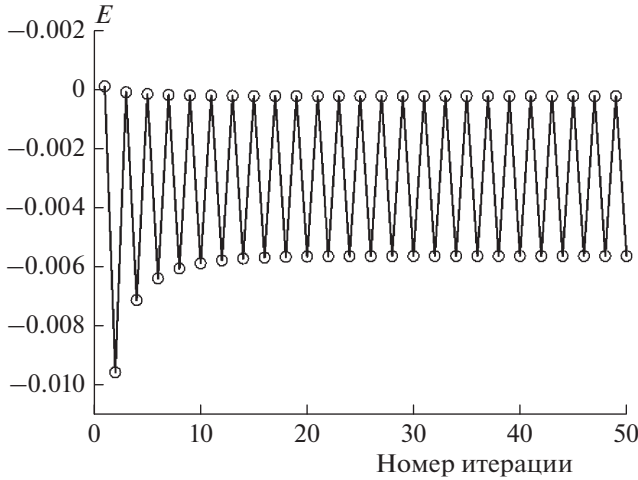
[12]. Частным решением ДНУШ на однородной решетке являются неподвижные солитоны с гладкой огибающей формы [15–21].

Некоторые практически интересные системы не являются однородными и могут содержать дефекты различной природы. В этих случаях для получения решения до сих пор применялись лишь численные методы. Однако, имея аналитические решения, полезно выяснить зависимость типа и характеристик последних от параметров задачи.

В настоящей работе решается задача о получении стационарного решения ДНУШ в решетке с единственным дефектом. Мы рассмотрели возможность получения основного состояния системы с помощью численных методов. Но оказалось, что диагонализация гамильтониана с последующей подстановкой промежуточного решения в гамильтониан не всегда является сходящимся итерационным процессом. Для линейных гамильтонианов минимум функционала  $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$  всегда совпадает с решением уравнения  $H | \Psi \rangle = E | \Psi \rangle$ . Но для нелинейных гамильтонианов существование соответствующего функционала отнюдь не является очевидным. И в работе построен такой функционал, минимизация которого приводит к уравнению Шредингера.

РЕШЕНИЕ ДНУШ КАК ПОИСК  
МИНИМУМА ФУНКЦИОНАЛА

Находится основное состояние (энергия и волновая функция) заряда на бесконечной одномерной



**Рис. 1.** Зависимость энергии от номера итерации при  $U = 0.25$ ,  $\beta = -0.25$ . Флуктуации энергии показаны только для 50 итераций, но они не исчезают и при дальнейших итерациях.

дискретной решетке, содержащей единственный примесный центр. Гамильтониан рассматриваемой системы в матричном представлении и в приближении сильной связи есть трехдиагональная матрица:

$$H_{jj} = 2 - \beta|\Psi_j|^2 - U\delta_{j,0}, \quad H_{j,j+1} = H_{j+1,j} = -1, \quad (1)$$

где  $\Psi_j$  – значение волновой функции на узле  $j$ . На главной диагонали находятся энергии взаимодействия с узлом, равные  $-\beta|\Psi_j|^2$ . В случае  $\beta < 0$  эта квадратичная нелинейность создает отталкивающий потенциал. Двойка в главной диагонали добавлена для того, чтобы дно зоны имело нулевую энергию. По сравнению со “стандартным” ДНУШ на узле  $j = 0$  дополнительно находится ловушка глубиной  $U$ . На побочной диагонали интегралы перескока выбраны равными  $-1$ , что определяет масштаб энергии. Для стационарного ДНУШ волновые функции можно считать действительными. Тогда уравнение Шредингера имеет вид

$$2\Psi_j - \Psi_{j-1} - \Psi_{j+1} - \beta\Psi_j^3 - U\delta_{j,0}\Psi_j = E\Psi_j. \quad (2)$$

Рассмотрим простой случай отсутствия нелинейности ( $\beta = 0$ ). Электрон находится в локализованном состоянии на ловушке и волновая функция основного состояния экспоненциально убывает:  $\Psi(j) \sim q^{|j|}$ . А именно, выражение для волновой функции имеет вид

$$\Psi(j) = \left(\frac{U^2}{4+U^2}\right)^{1/4} q^{|j|}, \quad q \equiv 0.5(\sqrt{4+U^2} - U), \quad (3)$$

$$E = 2 - \sqrt{4+U^2}.$$

Уравнение (2) решается методом итераций. Для этого начальную волновую функцию можно выбрать, например, в виде  $\Psi_j \sim \exp(-|j|)$ . Затем

необходимо нормировать это решение на 1 и подставить его в гамильтониан (1). После численной диагонализации получается новое значение волновой функции, которое вновь подставляется в гамильтониан, и т.д. В результате получается требуемое основное состояние нелинейной задачи – его энергия и волновая функция. Для достижения машинной точности  $\sim 10^{-15}$  обычно хватает 100 итераций. Заметим, что для нелинейных гамильтонианов сходимость итерационного процесса отнюдь не является очевидной. И, действительно, оказалось, что при некоторых значениях параметров итерационный процесс не сходится.

На рис. 1 показан пример отсутствия сходимости итерационного процесса для отрицательного значения параметра нелинейности  $\beta$ . Процесс осциллирует по энергии между двумя состояниями. Возможно, что несходимость связана с квазивырождением уровней энергии соответствующего гамильтониана; для малых значений  $N$  квазивырождение снимается и итерационный процесс сходится.

Однако существует другой способ численного нахождения энергии основного состояния. А именно, оказывается можно подобрать функционал, минимум которого для рассматриваемой задачи даст основное состояние. Этот функционал имеет следующий вид:

$$\Phi\{\Psi\} = 2\sum_i \Psi_j^2 - 2\sum_i \Psi_j \Psi_{j+1} - \frac{\beta}{2}\sum_i \Psi_j^4 - U\Psi_0^2. \quad (4)$$

Заметим, что первое слагаемое в (4) по условию нормировки равно двум. Оно оставлено в виде суммы для большей наглядности последующих соотношений. Заметим, что в обычном случае (в отсутствие нелинейности) минимум функционала  $\langle\Psi|H|\Psi\rangle$  очевидным образом дает основное состояние. Однако предлагаемый функционал (3) отличается от  $\langle\Psi|H|\Psi\rangle$  множителем  $(\beta/2)$  вместо  $\beta$ .

Для учета нормировки волновой функции добавим к функционалу (4) множитель Лагранжа  $\mu$  и рассмотрим следующее выражение:

$$\Omega\{\Psi\} \equiv \Phi\{\Psi\} - \mu\left(\sum_i \Psi_j^2 - 1\right). \quad (5)$$

Уравнения для минимума этого функционала ( $d\Omega/d\Psi = 0$ ) имеют вид

$$4\Psi_j - 2\Psi_{j-1} - 2\Psi_{j+1} - 2\beta\Psi_j^3 - 2U\delta_{j,0} = 2\mu\Psi_j. \quad (6)$$

Как видно, эти уравнения с точностью до множителя “2” совпадают с уравнением Шредингера (2). При этом множитель Лагранжа  $\mu$  играет роль энергии. Отметим также, что минимизация функционала  $\Phi\{\Psi\}$ , в отличие от метода итераций, **всегда** сходится к правильному результату.

Минимум функционала  $\Phi\{\Psi\}$  можно искать методом градиентного спуска. Но при этом на каж-

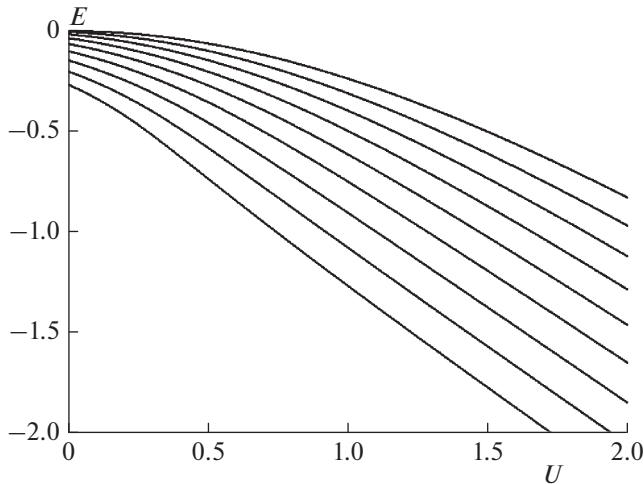


Рис. 2. Энергия основного состояния как функция глубины ловушки  $U$  при разных значениях параметра  $\beta$ . Кривые сверху вниз:  $\beta = 0, 0.25, 0.5, \dots, 2.0$ . Кривая для случая  $\beta = 0$  построена по формулам (3).

дом шаге будет необходимо восстанавливать нормировку волновой функции. Чтобы избежать этой трудности, удобнее использовать ту составляющую  $\nabla\Phi$ , которая перпендикулярна поверхности постоянной нормы. А именно, вместо градиента  $\nabla\Phi$  для минимизации целесообразно использовать выражение  $\nabla\Phi - \Psi(\Psi\nabla\Psi)$ . Найденная волновая функция подставляется в выражение для энергии  $\langle\Psi|H|\Psi\rangle$ :

$$E\{\Psi\} = 2\sum_j \Psi_j^2 - 2\sum_j \Psi_j \Psi_{j+1} - \beta\sum_j \Psi_j^4 - U\Psi_0^2. \quad (7)$$

Отметим также, что возможность построения функционала, минимум которого дает основное состояние, носит более общий характер, чем изучаемый конкретный случай. Действительно, рассмотрим гамильтониан с произвольной диагональной нелинейностью  $F(\Psi_i)$ :

$$H_{i,k} = H_{i,k}^0 + F(\Psi_i)\delta_{i,k}.$$

Тогда соответствующий функционал будет иметь следующий вид:

$$\tilde{\Phi} = \sum \Psi_i H_{i,k}^0 \Psi_k + \sum f(\Psi_i) + \mu(1 - \sum \Psi_k^2),$$

где функция  $f(x)$  связана с функцией  $F(x)$  соотношением  $df/dx = 2xF(x)$ . Можно также рассмотреть случай недиагональной нелинейности, например хорошо известный случай приближения сильной связи  $\sim\Psi_j\Psi_{j+1}$ . Оказалось, что и тогда для гамильтониана можно подобрать соответствующий функционал.

Так как волновая функция основного состояния симметрична относительно узла  $j = 0$ , то при поиске минимума функционала  $\Phi\{\Psi\}$  можно вдвое уменьшить число переменных, и тогда  $j \in [0, N]$ . В этом

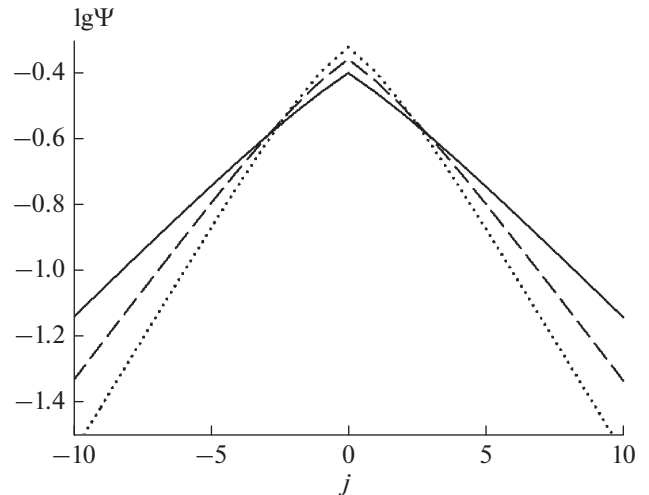


Рис. 3. Экспоненциальное спадание волновых функций основного состояния для разных значений параметра  $\beta$ : 0.25 (сплошная линия), 0.5 (штриховая) и 0.75 (точечная);  $U = 0.25$ .

случае минимизируемый функционал (4) и условие нормировки приобретают следующий вид:

$$\Phi\{\Psi\} = -4\sum_{j=0}^N \Psi_j \Psi_{j+1} - \beta\sum_{j=1}^N \Psi_j^4 - \frac{\beta}{2}\Psi_0^4 - U\Psi_0^2, \quad (8)$$

$$\Psi_0^2 + 2\sum_{j=1}^N \Psi_j^2 = 1.$$

Слагаемое  $2\sum \Psi_j^2$  в первой строке (8) опущено, так как по условию нормировки оно равно двум.

Чтобы убедиться в достаточной длине  $N$  изучаемых решеток, рассмотрен случай и циклических граничных условий. При этом к гамильтониану (1) необходимо добавить матричные элементы  $H_{N,-N} = H_{-N,N} = -1$ , а к функционалу  $\Phi\{\Psi\}$  для соблюдения нормировки нужно добавить член  $-2\Psi_N^2$ .

На рис. 2 показана зависимость энергии основного состояния от значений параметров  $\beta$  и  $U$ . Вычисления проводились как методом итераций (когда этот метод сходится), так и минимизацией функционала  $\Phi\{\Psi\}$ . Совпадение результатов обоих методов составило  $\sim 10^{-15}$ .

Волновые функции уже на небольшом удалении ( $|j| \geq 5$ ) от примесного узла спадают экспоненциально, но на узле  $j = 0$  производные претерпевают излом. На рис. 3 в качестве примера показаны волновые функции для разных значений параметра  $\beta$  при глубине ловушки  $U = 0.25$ .

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Задачу решения ДНУШ с ловушкой можно решать численно для уравнения Шредингера, однако итерационный процесс, необходимый для получения решения, сходится не всегда. Предложен оригинальный способ, позволяющий обойти эту проблему. Подход заключается в построении функционала  $\Omega\{\Psi\}$ , который в общем случае не является функционалом  $\langle\Psi|H|\Psi\rangle$  исходного гамильтониана. Требование к этому функционалу состоит в том, чтобы производная  $d\Omega/d\Psi$  приводила (с точностью до известных коэффициентов) к правильному уравнению Шредингера. Минимизация полученного функционала, например модифицированным методом наискорейшего спуска, всегда приводит к получению энергии основного состояния и волновой функции. В тех случаях, когда итерационный процесс сходится, достигается совпадение метода итераций и минимизации функционала  $\sim 10^{-15}$ .

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kevrekidis P.G., Rasmussen K.Ø., Bishop A.R. // Intern. J. Mod. Phys. B. 2001. V. 15. P. 2833.
2. Eisenberg H.S., Silberberg Y., Morandotti R., Boyd A.R., Aitchison J.S. // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81. P. 3383.
3. Trombettoni A., Smerzi A. // Ibid. 2001. V. 86. P. 2353.
4. Abdullaev F.Kh., Baizakov B.B., Darmanyan S.A., Kononov V.V., Salerno M. // Phys. Rev. A. 2001. V. 64. P. 043606.
5. Springer Tracts in Modern Physics / Eds. Fujimori A., Kühn J., Müller Th., Steiner F., Trümper, Wölfl P. V. 232. Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag. 2009.
6. Eilbeck J.C., Johanson M. // Localization and energy transfer in nonlinear systems / Eds. Vázquez L., MacKay R.S., Paz Zorzano M., New Jersey, London, Singapore, Hong Kong: World Scientific, 2003. P. 44.
7. Ablowitz M.J., Prinari B., Trubatch A.D. Discrete and continuous nonlinear Schrödinger systems. Cambridge University Press. 2004. P. 46.
8. Scharf R., Bishop A.R. // Phys. Rev. A. 1991. V. 43. P. 6535.
9. Molkenhain N., Hu S., Niemi A.J. // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 106. P. 078102.10.
10. Астахова Т.Ю., Кашин В.А., Лихачев В.Н., Виноградов Г.А. // Хим. физика. 2016. Т. 35. № 12. С. 1.
11. Лихачев В.Н., Виноградов Г.А. // Хим. физика. 2018. Т. 37. № 6. С. 63.
12. Лихачев В.Н., Виноградов Г.А. // Хим. физика. 2018. Т. 37. № 12. С. 42.
13. Eilbeck J.C., Lomdahl P.S., Scott A.C. // Physica D. 1985. V. 16. P. 318.
14. Hasegawa A. Optical Solitons in Fibers. Berlin: Springer-Verlag, 1989.
15. Dmitriev S.V., Kevrekidis P.G., Yoshikawa N., Frantzeskakis D.J. // J. Phys. A: Math. Theor. 2007. V. 40. P. 1727.
16. Dmitriev S.V., Kevrekidis P.G., Sukhorukov A.A., Yoshikawa N., Takeno S. // Phys. Lett. A 2006. V. 356. P. 324.
17. Pelinovsky D.E. // Nonlinearity. 2006. V. 19. P. 2695.
18. Pelinovsky D.E., Melvin T.R.O., Champneys A.R. // Physica D. 2007. V. 236. P. 22.
19. Pelinovsky D.E., Rothos V.M. // Ibid. 2005. V. 202. P. 16.
20. Qin W.-X., Xiao X. // Nonlinearity. 2007. V. 20. P. 2305.
21. Jenkinson M., Weinstein M.I. // Ibid. 2016. V. 29. P. 27.