

Binding energies of quantum dipole in two dimensions

E. A. Koval¹, O. A. Koval¹

¹Joint Institute for Nuclear Research, Dubna

23 April 2018

Outline

- 1 Quantum Dipole in two dimensions
- 2 Numerical scheme for binding energies of a 2D quantum dipole
- 3 Results

Quantum Dipole in two dimensions

The spectrum of bound states for a model of an edge dislocation is investigated. The deformation potential due to an straight edge dislocation, oriented along the Z axis, within a continuum model, is given by^{1,2}

$$V(\rho, \phi) = p \frac{\cos(\phi)}{\rho}, \quad (1)$$

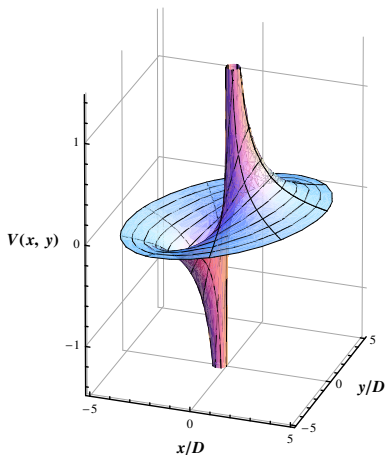
where p is the strength of the “dipole” potential, ρ is the distance from the dislocation axis, and ϕ is the azimuthal angle, defined in the XY plane. In an electrostatics context this potential can be realized as a dipole built by bringing two infinite line charges of opposite sign close together².

¹Bound states of edge dislocations: The quantum dipole problem in two dimensions. / K. Dasbiswas [и др.] // *Physical Review B*. 2010. Т. 81, № 6. С. 064516.

²*Amore P., Fernández F. M.* Bound states for the quantum dipole moment in two dimensions. // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2012. Т. 45, № 23. С. 235004.

Model of two-dimensional (2D) quantum dipole

For $\rho > 0$ the potential is attractive for $x < 0$ and repulsive for $x > 0$. Thus bound states are allowed in $x < 0$ region. Beside the potential is invariant under reflection about the X axis $V(\rho, \phi) = V(\rho, -\phi)$.



The potential surface of the deformation potential $V(x, y)$.

Model of two-dimensional (2D) quantum dipole

The quantum dipole problem is addressed by considering the solution of the corresponding two-dimensional Schrödinger equation (2D SE) ²:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\rho, \phi) + p\frac{\cos(\phi)}{\rho}\Psi(\rho, \phi) = E\Psi(\rho, \phi), \quad (2)$$

which in the units of length $\frac{\hbar^2}{2mp}$ and energy $\frac{2mp^2}{\hbar^2}$ reads:

$$-\nabla^2\Psi(\rho, \phi) + \frac{\cos(\phi)}{\rho}\Psi(\rho, \phi) = \epsilon\Psi(\rho, \phi). \quad (3)$$

Due to the symmetry of the potential the bound states are either even $\Psi(\rho, \phi) = \Psi(\rho, -\phi)$ or odd ($\Psi(\rho, \phi) = -\Psi(\rho, -\phi)$).

This potential is **nonseparable** and thus an appropriate numerical scheme, that can treat the 2D Schrödinger equation without simplifications, is needed.

Numerical scheme overview

- To tackle the 2D Schrödinger equation we apply the variation of the discrete-variable method, proposed in V.S.Melezhik paper³ for a solution of the multichannel scattering problem.
- As basis of functions for wave function expansion over angular variable we use eigenfunction of the operator $h^{(0)}(\phi) = \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$: functions $\xi_m(\phi) = \frac{(-1)^m}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$.
- Wave function is expanded as follows:

$$\Psi(\rho, \phi) \approx \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{m=-M}^M \sum_{j=0}^{2M} \xi_m(\phi) \xi_{mj}^{-1} \psi_j(\rho) = \frac{1}{(2M+1)\sqrt{\rho}} \sum_{j=0}^{2M} \sum_{m=-M}^M e^{im(\phi-\phi_j)} \psi_j(\rho), \quad (4)$$

where $\xi_{mj}^{-1} = \frac{2\pi}{2M+1} \xi_{jm}^* = \frac{\sqrt{2\pi}}{2M+1} e^{-im(\phi_j-\pi)}$ — is the inverse matrix to the square matrix $(2M+1) \times (2M+1)$ $\xi_{jm} = \xi_m(\phi_j)$, that is defined on the uniform angular grid $\phi_j = \frac{2\pi j}{2M+1}$ (где $j = 0, 1, \dots, 2M$). In the grid's nodes ϕ_j : $\Psi(\rho, \phi_j) \approx \psi_j(\rho)/\sqrt{\rho}$.

³ *Melezhik V. S.* New method for solving multidimensional scattering problem. // *Journal of Computational Physics*. 1991. T. 92, № 1. С. 67—81.

2D SE discretization

In representation (4) 2D SE transforms in the system of $(2M + 1)$ coupled second-order differential equations:

$$\frac{1}{2m_r} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \psi_j(\rho) - \frac{1}{4\rho^2} \psi_j(\rho) + \sum_{j'=0}^{2M} V_{jj'} \psi_{j'}(\rho) - \frac{1}{\rho^2} \sum_{j'=0}^{2M} h_{jj'}^{(0)} \psi_{j'}(\rho) \right) = E \psi_j(\rho), \quad (5)$$

which with the transformed boundary conditions при разложении (4) forms a boundary problem. The nondiagonal matrix of $h^{(0)}$ operator is defined by the expression:

$$h_{jj'}^{(0)} = - \sum_{j''=-M}^M j''^2 \xi_{jj''} \xi_{j''j'}^{-1}. \quad (6)$$

Boundary conditions

Since expression $\Psi_j/\sqrt{\rho}$ must be finite at $\rho = 0$, radial components Ψ_j vanish at $\rho \rightarrow 0$ and left boundary condition reads:

$$\Psi_j(0) = 0. \quad (7)$$

The wave function decay for bound state problem impose the right boundary condition:

$$\psi_j(\rho \rightarrow \infty) \rightarrow 0 \quad (j = 0, 1, \dots, 2M). \quad (8)$$

Grid over radial variable

To discretize the boundary problem we employ nonuniform grid: $\rho_n = \rho_N t_n^2$, ($n = 1, 2, \dots, N$), which nodes are mapped $\rho_n \in [0, \rho_N \rightarrow \infty]$ on a uniform grid $t_n \in [0, 1]$.

The seven-point finite difference approximation of six-order accuracy is used for the derivatives. The eigenvalue problem is solved by the method of inverse iterations with shift. An obtained on each iteration matrix problem is tackled with the matrix modification of the sweep algorithm for band matrix.

Numerical scheme advantages

- Comparing with variational studies we have the approximation error estimate⁴ of the used wave function expansion (4), that indicates a fast convergence over the number of angular grid nodes.
- Obtained matrices has band structure, that is minimizing computational resources needs.
- Fast convergences over angular grid (i.e. $M = 20$) and over inverse iterations number (i.e. typical iterations number needed ≈ 30) are observed.

⁴*Kolmogorov A. N.* Zur Grossenordnung des restgliedes Fourierschen Reihen differenzierbarer Funktionen. // *Mathematische Annalen*. 1935. T. 36. C. 521—526.

Results

With the help of the proposed numerical scheme we have calculated up to 7 significant digits the binding energies of a quantum dipole model in 2D and corresponding wave functions of the five low-lying even bound states and improve the results accuracy of the previous studies^{5,6}.

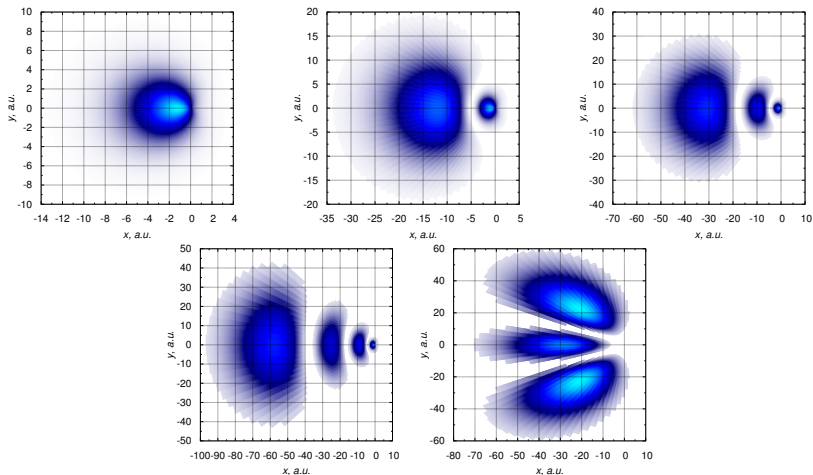
The calculated binding energies ϵ_b of five ($n=1-5$) low-lying even bound states of a quantum dipole are in a good agreement with the results of other authors, obtained with variational techniques over 2D Coulomb eigenfunctions¹ and over Slater function².

n ,	ϵ_b , arb.u. ¹	ϵ_b , arb.u. ²	ϵ_b , arb.u.
1	0.0970	0.13774(16)	0.1377485
2	0.0328	0.04115(24)	0.0411588
3	0.0221	0.01996(79)	0.0199738
4	0.0167	0.01185(25)	0.0118589
5	0.0119	0.00974(72)	0.0097471

⁵Bound states of edge dislocations: The quantum dipole problem in two dimensions. / K. Dasbiswas [и др.] // *Physical Review B*. 2010. Т. 81, № 6. С. 064516.

⁶Amore P., Fernández F. M. Bound states for the quantum dipole moment in two dimensions. // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2012. Т. 45, № 23. С. 235004.

2D probability density



The calculated probability density $|\Psi(\rho, \phi)|^2$ of the first five low-lying even bound states.

Thank you for your attention!

Список публикаций

- A1. Koval E. A., Koval O. A., Melezhhik V. S. Anisotropic quantum scattering in two dimensions // Physical Review A. — 2014. — Т. 89, № 5. — С. 052710.
- A2. Koval E. A., Koval O. A. Anisotropic Features of Two-Dimensional Hydrogen Atom in Magnetic Field // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2017. — Т. 125, № 1. — С. 35—42. — [ЖЭТФ 152, 45 (2017)].
- A3. Koval E. A., Koval O. A. Excited states of two-dimensional hydrogen atom in tilted magnetic field: Quantum chaos // Physica E. — 2017. — Т. 93. — С. 160—166.
- A4. Koval E., Koval O., Melezhhik V. Numerical solution of the quantum scattering problem in the plane // Physics of Particles and Nuclei Letters. — 2015. — Т. 12, № 3. — С. 448—451. — ISSN 15474771. — [Письма в ЭЧАЯ 12, 702 (2015)].
- A5. Коваль О. А., Коваль Е. А. Моделирование связанных состояний квантовых систем в двумерной геометрии атомных ловушек // Вестник РУДН. Серия Математика. Информатика. Физика. — 2014. — Т. 2, № 1. — С. 369— 374.

Список основных тезисов конференций

- A6. Koval E., Koval O. Two-dimensional exciton spectrum in GaAs quantum well in tilted magnetic field // Book of Abstracts of the EGAS 49th conference of the European Group of Atomic Systems. — 2017. — B31.
- A7. Koval E., Koval O. Theoretical Investigation of 2D Hydrogen in Magnetic Field // Extended Abstracts of 12th European Conference on Atoms Molecules and Photons. — 2016. — C. 273.
- A8. Koval E., Koval O., Melezhik V. Anisotropic quantum scattering in two dimensions // Book of Abstracts of the EGAS 46th conference of the European Group of Atomic Systems. — 2014. — C. 127.
- A9. Koval E., Koval O. Modeling of bound states of quantum systems in a twodimensional geometry of atomic traps // Book of Abstracts of the EGAS 46th conference of the European Group of Atomic Systems. — 2014. — C. 130.

Конечно-разностная аппроксимация

Семиточечная конечно-разностная аппроксимация второй производной шестого порядка точности

$$\frac{d^2}{d\rho^2} \psi_n = \frac{1}{180h^2} (2\psi_{n-3} - 27\psi_{n-2} + 270\psi_{n-1} - 490\psi_n + 270\psi_{n+1} - 27\psi_{n+2} + 2\psi_{n+3}) + O(h^6) \quad (9)$$

применяется в точках ρ_n сетки по радиальной переменной.

- Возникающие алгебраические задачи имеют вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{n'=n}^{n+3} (\hat{A} - \tilde{\lambda} \hat{I})_{nn'} \psi_{n'}^{(k+1)} = \psi_n^{(k)}, \quad n = 1 \\ \sum_{n'=n-1}^{n+3} (\hat{A} - \tilde{\lambda} \hat{I})_{nn'} \psi_{n'}^{(k+1)} = \psi_n^{(k)}, \quad n = 2 \\ \sum_{n'=n-2}^{n+3} (\hat{A} - \tilde{\lambda} \hat{I})_{nn'} \psi_{n'}^{(k+1)} = \psi_n^{(k)}, \quad n = 3 \\ \sum_{n'=n-3}^{n+3} (\hat{A} - \tilde{\lambda} \hat{I})_{nn'} \psi_{n'}^{(k+1)} = \psi_n^{(k)}, \quad n = 4, \dots, N-3 \\ \sum_{n'=n-3}^{n+2} (\hat{A} - \tilde{\lambda} \hat{I})_{nn'} \psi_{n'}^{(k+1)} = \psi_n^{(k)}, \quad n = N-2 \\ \sum_{n'=n-3}^{n+1} (\hat{A} - \tilde{\lambda} \hat{I})_{nn'} \psi_{n'}^{(k+1)} = \psi_n^{(k)}, \quad n = N-1 \\ \sum_{n'=n-3}^n (\hat{A} - \tilde{\lambda} \hat{I})_{nn'} \psi_{n'}^{(k+1)} = \psi_n^{(k)}, \quad n = N. \end{array} \right. \quad (10)$$

Метод обратных итераций со сдвигом

Метод обратных итераций со сдвигом для решения задачи на собственные значения (с.з.)

$$\hat{A}\psi_i = \lambda_i\psi_i \quad (11)$$

состоит в применении итерационного процесса, обратного к степенному:

$$\psi^{(k+1)} = \hat{A}^{-1}\psi^{(k)}, (k = 0, 1, \dots) \quad (12)$$

сходящийся к наибольшему с.з. \hat{A}^{-1} , т.е. наименьшему с.з. \hat{A} . Для ускорения сходимости применяется "метод сдвига": итерационный процесс применяется к "сдвинутой" матрице $\hat{A} - \tilde{\lambda}_i\hat{I}$, где $\tilde{\lambda}_i$ — параметр сдвига. Тогда итерационный процесс быстро сходится к минимальному собственному значению $(\lambda_i - \tilde{\lambda}_i)$, определяя собственные значения исходной задачи λ_i с высокой точностью за минимальное число итераций. Для избежания переполнений на каждой итерации вектор нормируется. Таким образом, результирующие формулы имеют вид:

$$(\hat{A} - \tilde{\lambda}_i\hat{I})\psi'^{(k+1)} = \psi^{(k)}, (k = 0, 1, \dots) \quad (13)$$

$$\lambda_i^{(k)} - \tilde{\lambda}_i = (\psi'^{(k+1)}, \psi^{(k)}) \quad (14)$$

$$\psi^{(k+1)} = \frac{\psi'^{(k)}}{\|\psi'^{(k)}\|} \quad (15)$$

Матричная модификация алгоритма прогонки

В данном приложении мы приводим описание матричной модификации алгоритма прогонки для решения матричного уравнения (10).

Следуя идее метода прогонки⁷, решение уравнения (10) определяется в следующей форме:

$$\psi_j = W_j^{(1)} \psi_{j+1} + W_j^{(2)} \psi_{j+2} + W_j^{(3)} \psi_{j+3}, \quad j = 1, \dots, N - 3 \quad (16)$$

где W_j представляют собой матрицы $[2M + 1] \times [2M + 1]$. Для определения искомого вектора ψ_j ($j = 1, \dots, N - 3$) необходимо вычислить матричные коэффициенты W_j . Для этого, записав уравнение (16) в соседних трех точках:

$$\psi_{j-k} = W_j^{(1)} \psi_{j-k+1} + W_j^{(2)} \psi_{j-k+2} + W_j^{(3)} \psi_{j-k+3}, \quad k = 1, 2, 3 \quad (17)$$

выразим ψ_{j-1} через $\psi_j, \psi_{j+1}, \psi_{j+2}$:

$$\psi_{j-1} = W_{j-1}^{(1)} \psi_j + W_{j-1}^{(2)} \psi_{j+1} + W_{j-1}^{(3)} \psi_{j+2}. \quad (18)$$

Аналогично для ψ_{j-2} запишем:

$$\psi_{j-2} = \left[W_{j-2}^{(1)} W_{j-1}^{(1)} + W_{j-2}^{(2)} \right] \psi_j + \left[W_{j-2}^{(1)} W_{j-1}^{(2)} + W_{j-2}^{(3)} \right] \psi_{j+1} + W_{j-2}^{(1)} W_{j-1}^{(3)} \psi_{j+2}. \quad (19)$$

⁷Calculus of variations. / I. M. Gelfand, R. A. Silverman [и др.]. Courier Corporation, 2000.

Матричная модификация алгоритма прогонки

Для ψ_{j-3} искомое выражение имеет вид:

$$\begin{aligned} \psi_{j-3} = & \left[W_{j-3}^{(1)} W_{j-2}^{(1)} W_{j-1}^{(1)} + W_{j-3}^{(1)} W_{j-2}^{(2)} + W_{j-2}^{(2)} W_{j-1}^{(1)} + W_{j-2}^{(3)} \right] \psi_j \\ & + \left[W_{j-3}^{(1)} W_{j-2}^{(1)} W_{j-1}^{(2)} + W_{j-3}^{(1)} W_{j-2}^{(3)} + W_{j-2}^{(2)} W_{j-1}^{(2)} \right] \psi_{j+1} \\ & + \left[W_{j-3}^{(1)} W_{j-2}^{(1)} W_{j-1}^{(3)} + W_{j-2}^{(2)} W_{j-1}^{(3)} \right] \psi_{j+2}, \end{aligned} \quad (20)$$

Из подстановки ψ_j из выражений (18–20) в матричное уравнение (10) и сравнения полученных выражений с уравнением 16 следует, что рекуррентные соотношения для вычисления коэффициентов $W_j^{(1)}$ записываются в виде:

$$\begin{aligned} -QW_j^{(1)} = & \hat{A}_{j,j-3} \left[W_{j-3}^{(1)} W_{j-2}^{(1)} W_{j-1}^{(2)} + W_{j-3}^{(1)} W_{j-2}^{(3)} + W_{j-2}^{(2)} W_{j-1}^{(2)} \right] + \\ & \hat{A}_{j,j-2} \left[W_{j-2}^{(1)} W_{j-1}^{(2)} + W_{j-2}^{(3)} \right] + \hat{A}_{j,j-1} W_{j-1}^{(2)} + \hat{A}_{j,j+1}, \end{aligned} \quad (21)$$

для коэффициентов $W_j^{(2)}$ представимы в следующей форме:

$$\begin{aligned} -QW_j^{(2)} = & \hat{A}_{j,j-3} \left[W_{j-3}^{(1)} W_{j-2}^{(1)} W_{j-1}^{(3)} + W_{j-2}^{(2)} W_{j-1}^{(3)} \right] + \\ & \hat{A}_{j,j-2} \left[W_{j-2}^{(1)} W_{j-1}^{(3)} \right] + \hat{A}_{j,j-1} W_{j-1}^{(3)} + \hat{A}_{j,j+2}, \end{aligned} \quad (22)$$

Матричная модификация алгоритма прогонки

для коэффициентов $W_j^{(3)}$ задаются следующим выражением:

$$- QW_j^{(3)} = \hat{A}_{j,j+3}. \quad (23)$$

Матрица Q определяется соотношением:

$$Q = \hat{A}_{j,j-3} \left[W_{j-3}^{(1)} W_{j-2}^{(1)} W_{j-1}^{(1)} + W_{j-3}^{(1)} W_{j-2}^{(2)} + W_{j-2}^{(2)} W_{j-1}^{(1)} + W_{j-2}^{(3)} \right] + \hat{A}_{j,j-2} \left[W_{j-2}^{(1)} W_{j-1}^{(1)} + W_{j-2}^{(2)} \right] + \hat{A}_{j,j-1} W_{j-1}^{(1)} + \hat{A}_{j,j}. \quad (24)$$

Коэффициенты $W_1^{(1)}$, $W_1^{(2)}$, $W_1^{(3)}$ вычисляются с помощью первых трех уравнений системы (10). Остальные коэффициенты $W_j^{(1)}$, $W_j^{(2)}$, $W_j^{(3)}$ ($j = 2, N$) вычисляются из рекуррентных соотношений (21–23), что аналогично «прямому ходу прогонки». Затем из последних трех уравнений системы (??) вычисляются ψ_j ($j = N - 2, N - 1, N$) и с помощью рекуррентных соотношений (16) («обратный ход прогонки») находим полное решение исходной задачи (10): ψ_j ($j = 1, N - 3$). Заметим, что результирующая сложность алгоритма является линейной по числу точек по радиальной переменной N , что значительно ускоряет вычисления по сравнению с методом Гаусса, LU-разложением, обладающими кубической сложностью по N : $O(N^3)$.