

Моделирование квантовых систем томографическим методом Монте-Карло

Ю.И.Богданов

Представлен новый метод статистического моделирования квантовых систем, основанный на генерации данных методом Монте-Карло и их целенаправленной томографии с минимизацией энергии. Численная процедура решения задачи базируется на оптимизации целевого функционала, обеспечивающего компромисс между максимизацией статистической функции правдоподобия и минимизацией энергии. Метод свободен от сложных и плохо обусловленных многомерных вычислительных процедур. Предложенный подход может быть применен для расчета волновых функций и энергий основного и возбужденных стационарных состояний сложных квантовых систем. Приведены примеры использования разработанного метода.

Ключевые слова: статистическое моделирование квантовых систем, метод Монте-Карло, статистическая функция правдоподобия.

1. Введение

Исследование квантовых систем имеет важное значение для решения современных прикладных задач физики, химии, микро- и наноэлектроники, биотехнологии и других разделов науки. Поскольку лишь небольшое число квантовомеханических задач допускает точное решение, все более актуальными здесь становятся методы численного математического моделирования. Возможный в обозримом будущем фундаментальный прорыв в области информационных технологий также связан с реализацией принципов квантовых вычислений [1–3]. Воплощение самой идеи квантового компьютера, однако, требует большой вычислительной работы, связанной с созданием физических принципов функционирования и взаимодействия основных элементов квантовой информатики – кубитов.

Методы численного исследования уравнения Шредингера можно разделить на регулярные (детерминированные) и статистические. При этом в задачах большой размерности детерминированные методы сталкиваются с серьезными проблемами вычислительного характера. Например, если мы хотим задать регулярную сетку для исследования системы из 10 частиц, то даже без учета спина рассматриваемая задача описывается в конфигурационном пространстве с размерностью 30. Пусть по каждой из переменных мы задаем сетку всего из 10 точек, тогда во всем конфигурационном пространстве придется задать 10^{30} узлов. Мы видим, что сложность моделирования растет экспоненциально с числом рассматриваемых частиц. Понятно, что такое количество данных не может быть записано и обработано ни на каком современном материальном носителе.

На наш взгляд, в исследовании квантовомеханических задач высокой размерности существенное продвижение вперед могут дать статистические методы моделирования. Это тем более оправданно в связи с фундаментальной статистической природой самих квантовых явлений. Необходимо учитывать, что статистическое поведение квантовых систем принципиально отличается от классических случайных процессов (таких как диффузия). Различие состоит в том, что при статистическом моделировании квантовых систем необходимо следовать известному принципу дополнительности Бора. Согласно этому принципу, для того чтобы статистическое описание квантового состояния было полным, необходимо использовать данные из различных унитарно связанных друг с другом представлений. Например, данные из координатного пространства должны быть дополнены данными из импульсного пространства [4, 5].

В рамках статистического подхода квантовое состояние может быть описано двумя способами: посредством вектора состояния (ψ -функции) или посредством задания выборки из взаимно дополнительных распределений. Если объемы взаимно дополнительных выборок велики, то оба указанных способа практически эквивалентны. В частности, по выборкам (посредством квантовой томографии) может быть приближенно восстановлена ψ -функция.

Энергия квантового состояния, минимизацию которой мы хотим осуществить, наиболее просто рассчитывается по взаимно дополнительным выборкам. При этом координатная выборка служит для расчета потенциальной энергии, а импульсная – кинетической. Заметим, что если бы речь шла о минимизации энергии в классическом случае, то задача сводилась бы к тривиальному скатыванию всех точек на дно потенциальной ямы в координатном пространстве и к остановке всех точек в импульсном пространстве. В квантовой механике, согласно соотношению неопределенностей, такой сценарий невозможен. Согласно принципу дополнительности, координатное и импульсное распределения должны быть отраже-

Ю.И.Богданов. Физико-технологический институт РАН, Россия, 117218 Москва, Нахимовский просп., 34; e-mail: bogdan@ftian.oivta.ru

нием одного и того же объекта – комплексной ψ -функции, а координатная и импульсная волновые функции должны быть связаны друг с другом преобразованием Фурье.

В процессе манипулирования данными в координатном и импульсном пространствах нужно отслеживать, чтобы за взаимно дополнительными данными стоял некий единый вектор состояния. Это требование обеспечивается посредством квантовой томографии. Использование так называемого корневого подхода хорошо зарекомендовало себя в экспериментальных исследованиях по статистическому восстановлению поляризационных квантовых состояний трех- и четырехуровневых оптических квантовых систем [6–9]. Методом математического моделирования показано, что статистические методы позволяют также эффективно восстанавливать и контролировать вектор состояния в гильбертовых пространствах высокой размерности (например, когда число базисных состояний измеряется многими сотнями или тысячами) [4, 5, 10].

В рамках предлагаемого подхода основной целью математического моделирования является расчет векторов стационарных квантовых состояний посредством статистической эволюции в направлении уменьшения энергии. В основе метода лежит процедура оптимизации целевого функционала, образованного взятыми с противоположными знаками слагаемыми, учитывающими статистическую функцию логарифмического правдоподобия и энергию. Итерационная численная процедура направлена на пошаговое уточнение вектора квантового состояния до тех пор, пока система не достигнет минимума энергии с высокой точностью. Заметим, что восстановление возбужденных стационарных состояний достигается элементарным уточнением алгоритма и не приводит к каким-либо усложнениям по сравнению с нахождением основного состояния. При этом необходимо просто работать в пространстве векторов, являющихся ортогональным дополнением к уже восстановленным векторам стационарных состояний.

Предлагаемый подход, на наш взгляд, обладает существенным преимуществом по сравнению с известным методом статистического моделирования квантовых систем – так называемым диффузионным квантовым методом Монте-Карло [11, 12]. Традиционный квантовый метод Монте-Карло основан на представлении уравнения Шредингера в виде уравнения диффузии для мнимого времени. Этот метод игнорирует фазу волновой функции, а следовательно, наличие взаимно дополнительных распределений. Поэтому диффузионный метод Монте-Карло пригоден, в основном, для оценки энергии основного состояния.

Предлагаемый метод статистической томографической селекции квантовых состояний имеет преимущество и перед традиционным вариационным методом [11, 12]. Основной недостаток последнего состоит в том, что, как правило, он опирается на удачный выбор пробной волновой функции с одним-двумя неизвестными свободными параметрами, которые выбираются из условия минимизации энергии. Если же параметров у ψ -функции много (десятки, сотни, тысячи), то вычислительная процедура становится плохо обусловленной задачей линейной алгебры. Кроме того, требуется вычисление астрономически большого числа интегралов. Заметим, что предлагаемый в настоящей работе метод не требует явного рас-

чета каких-либо интегралов. Вычислительная задача, связанная с решением корневого уравнения правдоподобия, является хорошо обусловленной, даже если вектор состояния содержит сотни и тысячи параметров, а возможности самого метода ограничены, в принципе, только ресурсами имеющейся в распоряжении исследователя вычислительной техники.

2. Вычислительные аспекты реализации метода

Процедура статистического томографического моделирования квантовых состояний представлена в виде схемы на рис.1.

Квантовое состояние описывается вектором состояния в s -мерном гильбертовом пространстве $c = (c_0, c_1, \dots, c_{s-1})$. Вектор состояния возникает в результате процедуры квантовой томографии посредством оптимизации целевого функционала. Оптимальное значение целевого функционала соответствует компромиссу между максимизацией статистического правдоподобия и минимизацией энергии. Генерация статистических данных осуществляется на основе метода Монте-Карло с использованием алгоритма Метрополиса. Вектор состояния уточняется на каждом шаге путем вычисления первой главной компоненты матрицы плотности, соответствующей накопленным данным.

Рассмотрим основные элементы алгоритма подробнее. Пусть нам необходимо обеспечить генерацию точек из распределения с плотностью вероятности $p(x)$. Алгоритм Метрополиса [13–15] основан на случайном блуждании точек, распределение которых асимптотически стремится к заданному распределению $p(x)$. Практически для выхода на асимптотическое распределение при оптимальном выборе параметров блуждания требуется небольшое (три-пять) число итераций. В нашем случае моделирование становится еще проще, поскольку эволюция распределений происходит плавно и, как показывают расчеты, можно обойтись одной-двумя итерациями.

Алгоритм случайного блуждания следующий. Пусть x_{old} – положение (координата) некоторой точки на данном шаге итерационного процесса, x_{new} – ее возможное новое (пробное) положение на следующем шаге. Новая возможная координата может быть рассчитана по формуле $x_{new} = x_{old} + dg$, где g – случайное число, равномерно распределенное на отрезке $[-0.5, 0.5]$, а d – определяемая пользователем величина, которая обычно составляет три-семь стандартных отклонений.

Суть метода заключается в том, что новое положение точки может быть принято или нет в зависимости от значения, вырабатываемого генератором псевдослучайных чисел. Для этого рассчитывается отношение f новой плотности вероятности к старой:

$$f = \frac{p(x_{new})}{p(x_{old})}. \quad (1)$$

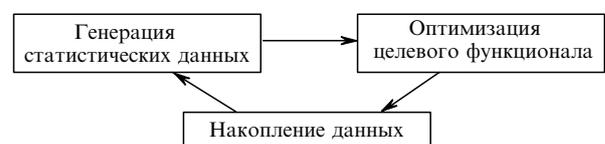


Рис.1. Схема томографического моделирования квантовых состояний.

Пусть данное отношение оказалось больше случайного числа γ , равномерно распределенного на отрезке $[0, 1]$, т. е. пусть $f > \gamma$; тогда новое значение координаты принимается, в противном случае – отвергается, и точка остается на старом месте. Действие алгоритма приводит к тому, что точка всегда перескакивает на новое место, если это заведомо выгодно (т. е. если в пробной точке плотность вероятности выше). Если же в новой точке плотность ниже, то и в этом случае перескок возможен, но только с некоторой вероятностью, которая тем выше, чем меньше различие в плотностях вероятности. Считается, что нужное распределение устанавливается максимально быстро (оптимум), если за одну итерацию передвигается порядка 30 % – 50 % точек, и из этих соображений обычно и выбирают значение параметра d .

Задача нахождения оценки максимального правдоподобия для вектора состояния с учетом ограничения на норму вектора и энергию основана на оптимизации вариационного функционала следующего вида [16]:

$$S = \ln L - \lambda_1(c_i c_i^* - 1) - \lambda_2 H_{ij} c_j c_i^*, \quad (2)$$

где H_{ij} – матричные элементы гамильтониана; $\lambda_{1,2}$ – множители Лагранжа. Здесь и далее предполагается суммирование по повторяющимся индексам.

Логарифмическое правдоподобие $\ln L$, учитывающее статистические данные во взаимно дополнительных координатном и импульсном пространствах, задается формулой

$$\ln L = \sum_{k=1}^n \ln (c_i c_j^* \varphi_i(x_k) \varphi_j^*(x_k)) + \sum_{l=1}^m \ln (c_i c_j^* \tilde{\varphi}_i(p_l) \tilde{\varphi}_j^*(p_l)), \quad (3)$$

где $\tilde{\varphi}_i(p)$ – фурье-образ функции $\varphi_i(x)$. Слагаемое, содержащее множитель Лагранжа λ_1 , учитывает условие нормировки вектора состояния.

Выбор множителя $\lambda_2 > 0$ определяет относительный вклад энергетического слагаемого в целевой функционал. Максимизация значения S является компромиссом между увеличением логарифмического правдоподобия $\ln L$ и уменьшением среднего значения энергии $\bar{E} = H_{ij} \times c_j c_i^*$. При больших значениях λ_2 превалирует вклад энергетического слагаемого, что соответствует вариационному методу Монте-Карло (Variational Monte Carlo – VMC). Малым значениям λ_2 отвечает случай решения задачи на основе заданной фиксированной выборки данных.

Для оценки средней энергии \bar{E} в конкретных численных расчетах, примеры которых будут представлены ниже, использовали выборочную среднюю энергию, т. е. сумму средней потенциальной энергии, которую можно измерить в координатном пространстве, и средней кинетической энергии, которую можно измерить в импульсном пространстве.

Уравнение, следующее из условия стационарности представленного выше целевого функционала, отвечает объединению статистического принципа максимального правдоподобия с вариационным принципом квантовой механики:

$$(R_{ij} - \lambda_2 H_{ij}) c_j = \lambda_1 c_i. \quad (4)$$

Здесь матрица R определяется формулой

$$R_{ij} = \sum_{k=1}^n \frac{\varphi_i^*(x_k) \varphi_j(x_k)}{P(x_k)} + \sum_{l=1}^m \frac{\tilde{\varphi}_i^*(p_l) \tilde{\varphi}_j(p_l)}{\tilde{P}(p_l)}, \quad (5)$$

а плотности $P(x_k)$ и $\tilde{P}(p_l)$ отвечают взаимно дополнительным данным в координатном и импульсном пространствах, соответствующим одному и тому же вектору состояния c . Предполагается, что в координатном пространстве проведено n , а в импульсном – m измерений.

Аналогично в рамках метода Монте-Карло для оценки матричных элементов гамильтониана можно получить

$$H_{ij} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \frac{\varphi_i^*(x_k) V(x_k) \varphi_j(x_k)}{P(x_k)} + \frac{1}{m} \sum_{l=1}^m \frac{\tilde{\varphi}_i^*(p_l) T(p_l) \tilde{\varphi}_j(p_l)}{\tilde{P}(p_l)}. \quad (6)$$

Здесь V и T – кинетическая и потенциальная энергии системы в импульсном и координатном пространствах соответственно.

Если обе части уравнения (4) умножить на c_i^* и просуммировать по i , то получим связь между параметрами Лагранжа:

$$(n + m) = \lambda_1 + \lambda_2 \bar{E}. \quad (7)$$

Описанный алгоритм соответствует анализу отдельной порции статистических данных, состоящей, как правило, из нескольких сотен или тысяч точек. Последовательное уточнение вектора состояния основывается на использовании накопленной матрицы плотности [16]. Так, если c_0 – вектор состояния на некоем шаге, соответствующий объему данных n_0 , а c – вектор, соответствующий объему данных n , то объединенная ненормированная матрица плотности будет определяться формулой

$$\rho = n_0 c_0 c_0^+ + n c c^+. \quad (8)$$

При этом можно показать, что уточненный вектор состояния следует оценивать как первую главную компоненту объединенной матрицы плотности [16, 17].

Заметим, что рассматриваемый метод одинаково пригоден для численного расчета как основного, так и возбужденных состояний. В последнем случае алгоритм должен быть дополнен простым условием, заключающимся в том, чтобы искомый вектор состояния был ортогонален всем ранее найденным стационарным состояниям.

3. Примеры использования метода

Первый иллюстративный пример посвящен рассмотрению стационарных состояний, отвечающих движению в потенциальной яме Пешля – Теллера. Соответствующий потенциал задается следующей формулой [18, 19]:

$$U(x) = -\frac{U_0}{\cosh^2(x/a)} = -\frac{\hbar^2}{2m_0 a^2} \frac{\lambda(\lambda - 1)}{\cosh^2(x/a)}. \quad (9)$$

Здесь m_0 – масса частицы; безразмерный параметр λ характеризует глубину потенциальной ямы; a – пространственный масштаб.

Рассматриваемая задача допускает точное решение. Ограничимся рассмотрением состояний дискретного спектра

ктра, т. е. связанных состояний, отвечающих отрицательной или нулевой энергии. Соответствующие энергетические уровни

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m_0a^2}(\lambda - 1 - n)^2, \quad (10)$$

где $n = 0, 1, \dots, n_{\max}$, причем связанным состояниям отвечает условие $n_{\max} \leq (\lambda - 1)$.

Волновые (ненормированные) функции стационарных состояний, выраженные через гипергеометрическую функцию, могут быть представлены в виде

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\cosh^{(\lambda-1-n)}(x/a)} \times F\left\{-n, 2\lambda - 1 - n, \lambda - n, \frac{1}{2}[1 - \tanh(x/a)]\right\}, \quad (11)$$

где $-\infty < x < \infty$. В другой форме их записи обычно используются полиномы Гегенбауэра, являющиеся частной формой полиномов Якоби:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\cosh^{(\lambda-1-n)}(x/a)} C_n^{(\lambda-n-1/2)}[\tanh(x/a)]. \quad (12)$$

На рис.2 иллюстрируется соответствие результатов численного моделирования точным решениям. Показана форма потенциальной ямы (для $\lambda = 7$) и уровни энергии стационарных состояний (рис.2,а), а также волновые функции для трех первых состояний (рис.2,б-г). Данные представлены в безразмерной системе единиц, в которой постоянная Планка \hbar , масса частицы m_0 и пространственный параметр масштаба потенциала a равны единице. В качестве базиса для разложения в численных расчетах были выбраны функции гармонического осциллятора.

Рассмотрение ограничивалось использованием первых 40 стационарных энергетических состояний осциллятора и полного числа сгенерированных случайных точек порядка нескольких сотен тысяч. Налицо хорошее согласие между результатами статистического томографического моделирования и точными решениями. Заметим, что для увеличения точности в 10 раз объем вычислений следует увеличить примерно в 100 раз.

Следующий пример связан с изучением двухэлектронной гелиоподобной атомной системы. Рассмотрим отрицательный ион водорода. Соответствующее связанное состояние двух электронов и протона является довольно «рыхлым». Энергия системы (экспериментальное значение $E \approx -0.5277$ ат. ед. [20]) лишь несколько ниже уровня -0.5 , при котором становится возможным самопроизвольный распад системы на атом водорода и электрон. Впервые отрицательный ион водорода рассматривался в классических работах Бете (Bethe), Хиллераса (Hylleraas), Чандрасекара (Chandrasekhar) [21–23] и в работах ряда других авторов.

Здесь мы сосредоточимся на аспектах, наиболее интересных с точки зрения квантовой информатики. В силу отмеченной «рыхлости» квантового состояния отрицательного иона водорода его рассмотрение существенно сложнее, чем атома гелия. В частности очень существенную роль играют эффекты запутанности (entanglement) квантового состояния. У отрицательного иона водорода отсутствуют возбужденные стационарные состояния, а основное состояние оказывается устойчивым только благодаря отмеченному эффекту запутанности, из-за которого волновая функция системы из двух электронов оказывается несепарабельной. Эта запутанность приводит к тому, что приближение самосогласованного поля Хартри–Фока оказывается недостаточным для объяснения существования стабильного отрицательного иона водорода.

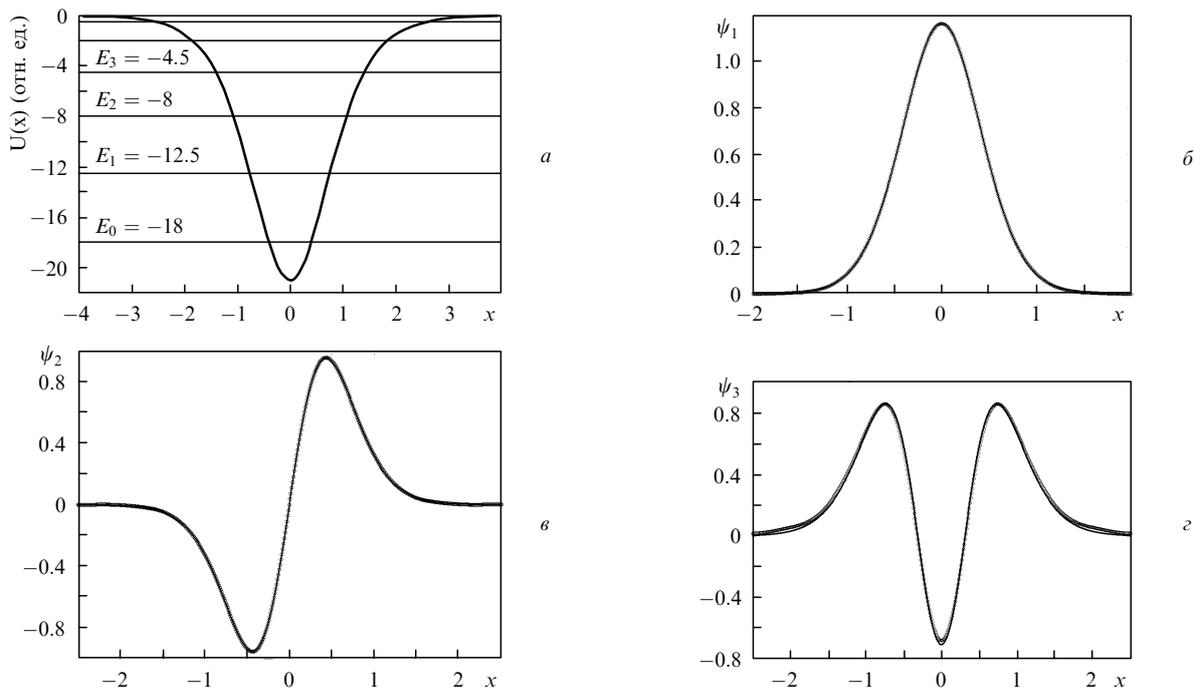


Рис.2. Моделирование стационарных квантовых состояний в потенциале Пешля–Теллера: форма потенциальной ямы (для $\lambda = 7$) и уровни энергии стационарных состояний (а), основное состояние ($F = 0.999993$, $E = -17.995$ ат. ед.) (б), первое возбужденное состояние ($F = 0.999992$, $E = -12.497$ ат. ед.) (в) и второе возбужденное состояние ($F = 0.998$, $E = -7.997$ ат. ед.) (г).

Рассматриваемая система имеет нулевой спин. Ее двухэлектронная волновая функция может быть представлена в виде произведения координатной и спиновой функций:

$$|\psi\rangle = \psi(r_1, r_2) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (13)$$

где вследствие антисимметричности спиновой функции координатная волновая функция $\psi(r_1, r_2)$ должна быть симметричной относительно перестановки частиц.

При рассмотрении атомных систем удобным базисом являются водородоподобные функции. При этом одночастичная волновая функция в координатном пространстве задается выражением

$$\psi(r) = \frac{\varphi_l(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (14)$$

в котором r, θ, φ – сферические координаты; $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – сферические функции; l и m – орбитальное и магнитное квантовые числа. Та же волновая функция в импульсном представлении имеет следующий вид:

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{\tilde{\varphi}_l(k)}{k} Y_{lm}(\Theta, \Phi), \quad (15)$$

где k, Θ и Φ – сферические координаты в импульсном пространстве.

Связь между координатной и импульсной волновыми функциями задается преобразованием Ханкеля [19]

$$\tilde{\varphi}_l(k) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} i^{-l} \int_0^\infty \varphi_l(r) j_l(kr) dr, \quad (16)$$

$$\varphi_l(r) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} i^l \int_0^\infty \tilde{\varphi}_l(k) j_l(kr) dk, \quad (17)$$

в котором сферические функции Бесселя, стоящие в подынтегральных выражениях, определены как

$$j_l(kr) = \left(\frac{\pi kr}{2}\right)^{1/2} J_{l+1/2}(kr), \quad (18)$$

а радиальные части волновой функции нормируются согласно условию

$$\int_0^\infty |\varphi_l(r)|^2 dr = \int_0^\infty |\tilde{\varphi}_l(k)|^2 dk = 1. \quad (19)$$

Заметим, что для расчета преобразования Ханкеля с водородоподобными функциями требуется только вычисление конечных сумм и интегрирование выражений, отвечающих произведению степенной и показательной функций.

В численном расчете базис был ограничен первыми десятью двухэлектронными функциями, образованными произведением одноэлектронных центрально-симметричных водородоподобных функций ($l = 0, n = 1, 2, 3, 4$). Для энергии системы было получено $E = -0.5273 \pm 0.0008$ ат. ед., что в пределах погрешности совпадает с экспериментальным значением, указанным выше.

Для того чтобы описание запутанности квантового состояния сделать наглядным, представим волновую

функцию двухчастичного состояния в виде разложения Шмидта [24, 25], в котором, как показывают численные расчеты, существенный вклад дают только две первые моды ($\psi_{1,2}$). В этом приближении радиальная двухчастичная волновая функция имеет следующий вид:

$$\psi(r_1, r_2) = \sqrt{\lambda_1} \psi_1(r_1) \psi_1(r_2) - \sqrt{\lambda_2} \psi_2(r_1) \psi_2(r_2). \quad (20)$$

Аналогично (19) будем нормировать эту волновую функцию условием

$$\int_0^\infty \int_0^\infty |\psi(r_1, r_2)|^2 dr_1 dr_2 = 1. \quad (21)$$

Расчет показывает, что $\lambda_1 \approx 0.88$ и $\lambda_2 \approx 0.12$, а суммарный вклад третьей и более высоких мод не превышает 0.5%. Найденные таким образом моды изображены на рис.3,а. Заметим, что моды Шмидта ортогональны друг другу: $\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = 0$.

Поясним физический смысл мод Шмидта. В качестве меры близости состояний $|\psi\rangle$ и $|\chi\rangle$ выберем квадрат модуля их скалярного произведения (fidelity) $F = |\langle \chi | \psi \rangle|^2$, причем очевидно, что $0 \leq F \leq 1$. Оказывается, что из всех сепарабельных состояний, задаваемых произведением $\chi(r_1)\chi(r_2)$, наиболее близким к двухчастичному состоянию $\psi(r_1, r_2)$ будет состояние, определяемое первой модой Шмидта, для которого параметр F принимает максимально возможное значение. Отсюда следует, что при использовании метода самосогласованного поля Хартри–Фока, соответствующего сепарабельному приближению, квантовое состояние может быть описано с точностью, не превышающей $\lambda_1 \approx 0.88$, и этого совершенно недостаточно для того, чтобы объяснить стабильность отрицательного иона водорода.

Из всех двухмодовых приближений наиболее близкой к истинной оказывается волновая функция, задаваемая двумя первыми модами Шмидта. От представления Шмидта нетрудно перейти к другой наглядной форме записи запутанного квантового состояния для отрицательного иона водорода:

$$\psi(r_1, r_2) = N(u_1(r_1)u_2(r_2) + u_2(r_1)u_1(r_2)), \quad (22)$$

где $N = (\sqrt{\lambda_1} + \sqrt{\lambda_2})/2$ – нормировочный множитель. Формула (22) может быть названа двухорбитальным приближением для волновой функции. Связь орбиталей с модами Шмидта задается преобразованием

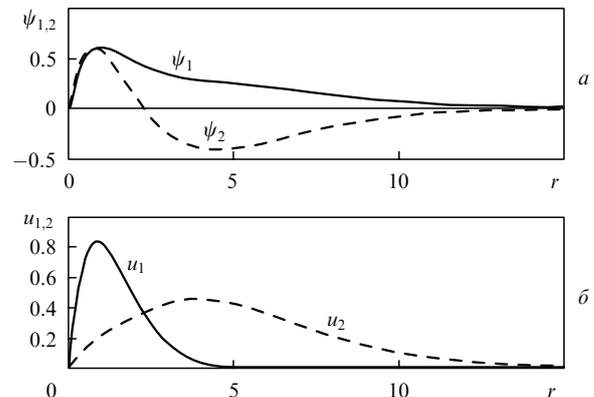


Рис.3. Моды Шмидта (а) и орбитали (б) для отрицательного иона водорода.

$$u_1(r) = \cos(\alpha)\psi_1(r) + \sin(\alpha)\psi_2(r), \quad (23)$$

$$u_2(r) = \cos(\alpha)\psi_1(r) - \sin(\alpha)\psi_2(r), \quad (24)$$

где угол α выбирается таким образом, чтобы разложение имело вид (22) и в нем не возникали бы слагаемые, пропорциональные $u_1(r_1)u_1(r_2)$ и $u_2(r_1)u_2(r_2)$. Это требование приводит к условию

$$\alpha = \arctan \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{1/4}, \quad (25)$$

из которого следует, что $\alpha \sim 30^\circ$. Полученные орбитали (рис.3,б), в отличие от мод Шмидта, неортогональны, и

$$\langle u_2 | u_1 \rangle = \frac{\sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2}}{\sqrt{\lambda_1} + \sqrt{\lambda_2}}. \quad (26)$$

Двухорбитальное приближение наглядно может быть интерпретировано следующим образом: каждый из электронов, стремясь занять ближнюю к протону орбиталь, «выталкивает» другой электрон на более дальнюю и более «размытую» орбиталь (см. рис.3,б).

4. Выводы

Сформулируем кратко основные результаты работы.

1. Предложен новый метод статистического моделирования квантовых систем, основанный на генерации взаимно дополнительных данных в координатном и импульсном пространстве и их целенаправленной томографии с минимизацией энергии. Генерация статистических данных осуществлялась на основе алгоритма Метрополиса. Итерационная процедура оценки вектора состояния была основана на решении корневого уравнения правдоподобия и вычислении первой главной компоненты матрицы плотности, соответствующей накопленным данным. Метод свободен от сложных и плохо обусловленных многомерных вычислительных процедур. Предложенный подход может быть применен для расчета волновых функций и энергий основного и возбужденных стационарных состояний квантовых систем.

2. Представлены примеры применения разработанного метода и предложенного алгоритма к квантовой системе на основе потенциала Пешля – Теллера, а также к двухэлектронному состоянию, описывающему отрицательный ион водорода. Проведено сравнение результатов численных расчетов с аналитическими решениями и экспериментальными данными, показавшее их хорошее согласие.

3. На основе разложения Шмидта проанализировано явление запутанности квантового состояния для отрицательного иона водорода. Показана невозможность интерпретации связанного состояния двух электронов и протона в рамках приближения самосогласованного поля Хартри – Фока и его адекватность предложенной в работе двухорбитальной модели. Выполнен численный расчет мод Шмидта и квантовых орбиталей для этой задачи.

1. Нильсен М, Чанг И. *Квантовые вычисления и квантовая информация* (М.: Мир, 2006).
2. Валиев К.А., Кокин А.А. *Квантовые компьютеры: надежды и реальность* (Москва – Ижевск: РХД, 2004).
3. Боумейстер Д., Экерт А., Цайлингер А. (ред.). *Физика квантовой информации. Квантовая криптография. Квантовая телепортация. Квантовые вычисления* (М.: Постмаркет, 2002).
4. Богданов Ю.И. *Оптика и спектроскопия*, **96**, 735 (2004).
5. Bogdanov Yu.I., in *New Topics in Quantum Physics Research* (New York: Nova Science, 2006, p.129).
6. Богданов Ю.И., Кривицкий Л.А., Кулик С.П. *Письма в ЖЭТФ*, **78** (6), 804 (2003).
7. Bogdanov Yu.I., Chekhova M.V., Krivitsky L.A., Kulik S.P., Penin A.N., Zhukov A.A., Kwek L.C., Oh Choo Hiap, Tey M.K. *Phys. Rev. A*, **70** (4), 042303 (2004).
8. Bogdanov Yu.I., Chekhova M.V., Kulik S.P., Maslennikov G.A., Oh Choo Hiap, Tey M.K., Zhukov A.A. *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 230503 (2004).
9. Bogdanov Yu.I., Galeev R.F., Kulik S.P., et al. *Phys. Rev. A*, **73**, 063810 (2006).
10. Bogdanov Yu.I. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.*, **6264**, 62640E (2006).
11. Towler M.D. *Phys. Stat. Sol. (b)*, **243**, 2573 (2006).
12. Foulkes W.M.C., Mitas L., Needs R.J., Rajagopal G. *Rev. Modern Phys.*, **73**, 33 (2001).
13. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H. *J. Chem. Phys.*, **21**, 1087 (1953).
14. Newman M.E.J., Barkema G.T. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford: Oxford University Press, 2001).
15. Гулд Х, Тобочник Я. *Компьютерное моделирование в физике. Ч. 2.* (М.: Мир, 1990).
16. Богданов Ю.И. *Основная задача статистического анализа данных: корневой подход* (М.: МИЭТ, 2002).
17. Bogdanov Yu.I., Kulik S.P. *Laser Phys.*, **16** (8), 1264 (2006).
18. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М.: Наука, 1974).
19. Флюге З. *Задачи по квантовой механике.Т.1.* (М.: Мир, 1974).
20. Григорьев И.С., Мейлихов Е.З. (ред.). *Физические величины (Справочник)* (М.: Энергоатомиздат, 1991).
21. Inokuti M., Bederson B. *Phys. Scr.*, **73**, 98 (2006).
22. Hylleraas E.A. *Z. Phys.*, **60**, 624 (1930).
23. Chandrasekhar S. *Rev. Mod. Phys.*, **16** (3–4), 301 (1944).
24. Богданов А.Ю., Богданов Ю.И., Валиев К.А. *Микроэлектроника*, **35**, 11 (2006).
25. Богданов А.Ю., Богданов Ю.И., Валиев К.А. *Вестник Моск. ун-та. Сер. 15. Вычислительная математика и кибернетика*, № 1, 37 (2007).