

УДК 530.145.1,535.14

## О СХОДИМОСТИ ИТЕРАЦИОННОЙ СХЕМЫ ОПЕРАТОРНОГО МЕТОДА ДЛЯ ОПИСАНИЯ СОБСТВЕННЫХ СОСТОЯНИЙ КВАНТОВОЙ МОДЕЛИ РАБИ

А. В. ЛЕОНОВ<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь

Рассматривается вопрос о скорости сходимости итерационной схемы операторного метода для собственных состояний квантовой модели Раби при различных способах выбора свободного параметра, который играет важную роль для решения этой задачи вне рамок приближения вращающейся волны. Проведено сравнение двух методов получения уравнений для вычисления указанного параметра: 1) из условия обращения в нуль ближайшего к диагональному нетривиального матричного элемента гамильтониана модели; 2) из условия совпадения свободного параметра с константой связи двухуровневой системы с внешним квантовым полем (использовалось в предыдущих работах). Показано, что первый способ обеспечивает максимальную (и при этом равномерную по константе связи) скорость сходимости метода и практически не зависит от значения константы связи модели, в то время как второй способ позволяет получить лучшее качественное и количественное поведение ее нулевого приближения, но проигрывает в скорости сходимости метода, которая при слабом значении константы связи носит сильно осциллирующий характер. Полученные результаты могут представлять интерес при описании двухфотонной и асимметричной квантовых моделей Раби, а также при исследовании поведения атомных систем в сильном резонансном поле.

**Ключевые слова:** модель Раби; операторный метод; двухуровневая система; квантовое поле; резонанс.

**Благодарность.** Автор выражает признательность И. Д. Феранчуку и О. Д. Скоромнику за плодотворные обсуждения и ценные указания при исследовании рассматриваемой задачи.

---

### Образец цитирования:

Леонов АВ. О сходимости итерационной схемы операторного метода для описания собственных состояний квантовой модели Раби. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2018;3:74–80.

### For citation:

Leonau AU. Investigating the convergence of the iteration scheme of operator method for description of eigenstates of the quantum Rabi model. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2018;3:74–80. Russian.

---

### Автор:

**Александр Владимирович Леонов** – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета.

### Author:

**Aliaksandr U. Leonau**, PhD (physics and mathematics), doцент; associate professor at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.  
[leonov.bsu@gmail.com](mailto:leonov.bsu@gmail.com)

# INVESTIGATING THE CONVERGENCE OF THE ITERATION SCHEME OF OPERATOR METHOD FOR DESCRIPTION OF EIGENSTATES OF THE QUANTUM RABI MODEL

A. U. LEONAU<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus

In the present paper we investigate the rate of convergence of the iteration scheme of the operator method in respect of calculating the eigenstates of the quantum Rabi model with different values of the free parameter which plays an important role when treating the problem beyond the rotating wave approximation. The two ways of selecting equations for the aforementioned parameter are analyzed: 1) the one which is based on putting to zero the nearest diagonal non-trivial matrix element of the Hamiltonian of the model; 2) the one when the value of the free parameter coincides with the value of the coupling constant between the two-level system and external quantum field that was used in our previous papers. It is shown that the first way of selection leads to the maximal (and uniform in respect of the coupling constant) rate of convergence that has almost no dependence on the coupling constant of the model, whereas the second way allows one to obtain both better qualitative and quantitative behavior of its zeroth order approximation however reducing the rate of convergence of the method that is of oscillatory character in case of small coupling constants. The obtained results could be useful for description of the double-photon and asymmetric Rabi models as well as for investigation of atomic systems in the strong external fields.

**Key words:** Rabi model; operator method; two-level system; quantum field; resonance.

**Acknowledgements.** The author would like to thank I. D. Feranchuk and O. D. Skoromnik for the fruitful discussions and valuable comments regarding the present research.

## Введение

Операторный метод (ОМ) [1] является одним из эффективных подходов к решению стационарного уравнения Шрёдингера: собственные состояния квантовой системы могут быть определены с любой заданной точностью при произвольных значениях параметров исходного гамильтониана. Этот метод был успешно апробирован как на хорошо изученных примерах [2–8], так и при исследовании других нетривиальных квантовых систем [9–12]. В частности, в рамках ОМ было проведено эффективное качественное и количественное исследование квантовой модели Раби (КМР) [13; 14] во всем диапазоне изменения ее параметров [9; 10]. При этом собственные векторы КМР были разложены по полному базисному набору, зависящему от произвольного (свободного) параметра, характеризующего сдвиг положения равновесия осцилляторов поля вследствие взаимодействия, а для достижения любой заданной точности при вычислении энергий системы была построена итерационная схема ОМ [1; 9]. Однако вопрос о выборе наиболее эффективного способа определения свободного параметра для КМР оставался открытым.

Недавно в работе [8] было показано, что наибольшая точность нулевого приближения ОМ для класса РТ-симметричных квантовых систем может быть достигнута путем выбора произвольного параметра ОМ из условия, чтобы ближайшие к диагональным матричные элементы оператора Гамильтона, рассчитанные в полном базисе, зависящем от этого параметра, обращались в нуль. Поэтому представляет интерес рассмотреть данный подход в применении к КМР, а также исследовать скорость сходимости итерационной схемы ОМ при таком выборе.

## Итерационная схема операторного метода для квантовой модели Раби

Задача на собственные значения и собственные функции КМР имеет следующий вид [9]:

$$\hat{H} |\Psi_{np}\rangle = E_{np} |\Psi_{np}\rangle, \quad \hat{P} |\Psi_{np}\rangle = p |\Psi_{np}\rangle, \quad (1)$$

$$\hat{H} = \frac{\Delta}{2} \hat{\sigma}_3 + \hat{a}^+ \hat{a} + f \hat{\sigma}_1 (\hat{a} + \hat{a}^+), \quad \hat{P} = \hat{\sigma}_3 e^{i\pi \hat{a}^+ \hat{a}}, \quad (2)$$

где  $\hat{H}$  – оператор Гамильтона КМР;  $\hat{P}$  – оператор комбинированной четности, который является интегралом движения КМР с собственными значениями  $p = \pm 1$ ;  $\Delta$  – энергетический зазор между уровнями двухуровневой системы (ДУС);  $\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_3$  – матрицы Паули;  $\hat{a}^+$  и  $\hat{a}$  – операторы рождения и уничтожения

квантов одномодового поля соответственно;  $f$  – константа взаимодействия ДУС с полем. Здесь и далее использована система единиц  $\hbar = c = 1$ , а также произведена нормировка всех энергетических величин на частоту одномодового квантового поля ( $\Omega = 1$ ).

Для решения системы уравнений (1) оказывается удобным совершить поворот ДУС вокруг оси  $y$  на угол  $\frac{\pi}{2}$  – при этом происходит преобразование  $\hat{\sigma}_3 \rightarrow \hat{\sigma}_1$ ;  $\hat{\sigma}_1 \rightarrow -\hat{\sigma}_3$ , так что входящие в (2) операторы принимают вид

$$\hat{H} = \frac{\Delta}{2} \hat{\sigma}_1 + \hat{a}^+ \hat{a} - f \hat{\sigma}_3 (\hat{a} + \hat{a}^+), \quad \hat{P} = \hat{\sigma}_1 e^{i\pi \hat{a}^+ \hat{a}}.$$

Записывая собственный вектор КМР в виде спинора, компонентами которого являются некоторые полевые функции

$$|\Psi_{np}\rangle = \begin{pmatrix} |\xi_{np}\rangle \\ |\eta_{np}\rangle \end{pmatrix}, \quad (3)$$

и подставляя выражение (3) в уравнения (1) с операторами (2), получим следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\Delta}{2} |\eta_{np}\rangle + (\hat{a}^+ \hat{a} - f(\hat{a} + \hat{a}^+) - E_{np}) |\xi_{np}\rangle = 0, \\ \frac{\Delta}{2} |\xi_{np}\rangle + (\hat{a}^+ \hat{a} + f(\hat{a} + \hat{a}^+) - E_{np}) |\eta_{np}\rangle = 0. \end{cases} \quad (4)$$

Уравнение на собственные значения и собственные функции оператора комбинированной четности позволяет связать между собой полевые функции:

$$|\eta_{np}\rangle = p e^{i\pi \hat{a}^+ \hat{a}} |\xi_{np}\rangle$$

и, таким образом, замкнуть выражения (4) на одну общую полевую функцию:

$$\left( \frac{\Delta}{2} p e^{i\pi \hat{a}^+ \hat{a}} + \hat{a}^+ \hat{a} - f(\hat{a} + \hat{a}^+) - E_{np} \right) |\xi_{np}\rangle = 0. \quad (5)$$

Если ввести обозначение

$$\hat{H}' = \frac{\Delta}{2} p e^{i\pi \hat{a}^+ \hat{a}} + \hat{a}^+ \hat{a} - f(\hat{a} + \hat{a}^+), \quad (6)$$

то исходная задача сводится к задаче на собственные состояния эффективного гамильтониана  $\hat{H}'$ , которую и будем решать в рамках ОМ.

Для решения уравнения (5) разложим собственный вектор  $|\xi_{np}\rangle$  по полному базисному набору, зависящему от произвольного параметра [9]:

$$|\xi_{np}\rangle = |n, u\rangle + \sum_{k \neq n} C_k^{np} |k, u\rangle, \quad (7)$$

где  $u$  – параметр, характеризующий сдвиг положения равновесия осцилляторов поля, которому соответствует следующее унитарное преобразование [9]:

$$|k, u\rangle = e^{-u(\hat{a} - \hat{a}^+)} |k\rangle. \quad (8)$$

Отметим также, что в (7) использована специальная форма нормировки исходного вектора  $\langle \xi_{np} | n, u \rangle = 1$ .

Вычислим матричные элементы гамильтониана (6) в базисе (8) [9]:

$$\begin{aligned} H_{nk}(u) &= \langle n, u | \hat{H}' | k, u \rangle = \\ &= \frac{\Delta}{2} p S_{nk}(u) + \delta_{nk} (n + u^2 - 2uf) + (u - f) (\sqrt{k} \delta_{n, k-1} + \sqrt{k+1} \delta_{n, k+1}), \end{aligned} \quad (9)$$

где  $S_{nk}(u)$  – матричные элементы оператора  $e^{i\pi \hat{a}^+ \hat{a}}$ :

$$S_{nk}(u) = \begin{cases} (-1)^n e^{-2u^2} \sqrt{\frac{k!}{n!}} (2u)^{n-k} L_k^{n-k}(4u^2), & n \geq k, \\ S_{kn}(u), & n < k, \end{cases}$$

где  $L_k^{n-k}(x)$  – обобщенные полиномы Лагерра.

Следуя общему алгоритму ОМ, получим итерационную схему, которая позволяет вычислить энергию системы и коэффициенты разложения из (7) с любой заданной наперед точностью:

$$E_{np}(i+1) = H_{nn} + \sum_{k \neq n} C_k^{np}(i) H_{nk}, \quad (10)$$

$$C_k^{np}(i+1) = [E_{np}(i) - H_{kk}]^{-1} \left[ H_{kn} + \sum_{l \neq n \neq k} C_l^{np}(i) H_{kl} \right], \quad (11)$$

где  $i$  – номер итерации. При этом в качестве нулевого приближения ( $i = 0$ ) для итерационной схемы выбираются условия:

$$E_{np}(0) = H_{nn}, \quad C_k^{np}(0) = 0.$$

По определению точные собственные значения задачи (1) не зависят от выбора произвольного параметра  $u$ , который фактически определяет представление для собственных векторов системы. В то же время скорость сходимости итерационной схемы (10), (11) может сильно зависеть от этого выбора. Поэтому рассмотрим данный вопрос более подробно.

### Алгоритм вычисления свободного параметра

В работах [9; 10] в качестве произвольного параметра использовалось значение  $u = f$ . Это было обусловлено заметным упрощением явного вида итерационной схемы – занулением некоторых членов в недиагональных матричных элементах (9) оператора Гамильтона (6). При этом нулевое приближение содержало все качественные особенности КМР и позволяло довольно точно вычислять ее энергию. Однако при малых значениях константы связи сходимость итерационной схемы носила сильно осциллирующий характер, что обуславливало необходимость вычисления достаточно большого количества итераций для достижения требуемой точности.

Рассмотрим альтернативный способ определения свободного параметра – по аналогии с [8] будем находить его из условия зануления ближайшего к диагональному нетривиального матричного элемента. Как было показано в [9], ближайшим связанным матричным элементам в базисе (8) соответствуют состояния  $n$  и  $n + q$  ( $q = p(-1)^n$ ). Таким образом, необходимое условие записывается в виде

$$H_{n,n+q} = \frac{\Delta}{2} p S_{n,n+q}(u) + (u - f) \sqrt{n + \frac{(1+q)}{2}} = 0. \quad (12)$$

С точки зрения численного расчета и однозначности получаемого значения выражение (12) удобнее переписать так:

$$\frac{\Delta}{2} p S_{n,n+q}(u) = -(u - f) \sqrt{n + \frac{(1+q)}{2}}. \quad (13)$$

Графическое решение уравнения (13) относительно свободного параметра  $u$ , соответствующее различным значениям константы связи ДУС с полем как для низко-, так и для высоковозбужденных состояний КМР, представлено на рис. 1, из которого видно, что при фиксированном наборе параметров  $n$ ,  $p$ ,  $\Delta$  с увеличением константы связи  $f$  происходит движение свободного параметра по кривой, пропорциональной осциллирующему матричному элементу  $S_{n,n+q}(u)$ .

На рис. 2 изображена зависимость собственного значения энергии КМР как функции номера итерации для обоих способов выбора свободного параметра. Как видно из рис. 2, а, при слабой связи ДУС с полем ( $f = 0,01$ ) новый способ выбора свободного параметра позволяет добиться требуемой точности уже к 10-й итерации, в то время как при  $u = f$  итерационная схема сходится достаточно медленно ( $i \sim 100$ ). При увеличении константы связи скорость сходимости итерационной схемы при выборе свободного параметра из условия (13) остается примерно постоянной ( $i \sim 10$ ), а для случая  $u = f$  она начинает возрастать ( $i \sim 25$  для  $f = 0,05$ ; см. рис. 2, б), достигая такого же значения при константе связи  $f \geq 0,1$  (см. рис. 2, в).

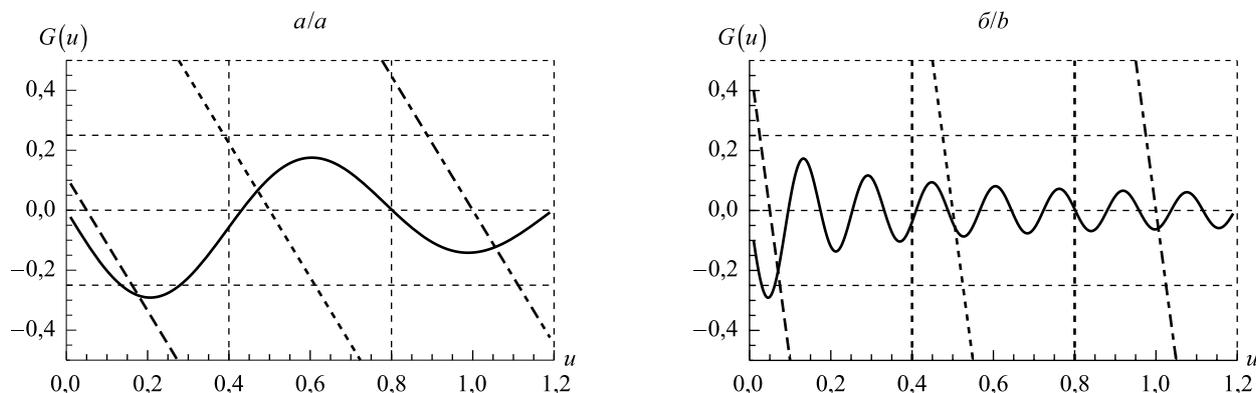


Рис. 1. Графическое решение уравнения (13) при  $p = +1$ ,  $\Delta = 1,0$  и  $n = 5$  (а),  $n = 100$  (б).  
 Сплошной линией изображена функция из левой части уравнения, штриховой, пунктирной и штрихпунктирной линиями – функция из правой части уравнения при  $f = 0,05$ ,  $f = 0,5$  и  $f = 1,0$  соответственно  
 Fig. 1. Graphical solution of the equation (13) for  $p = +1$ ,  $\Delta = 1.0$  and  $n = 5$  (a),  $n = 100$  (b).  
 The solid line shows the function from the left side of the equation, whereas dashed, dotted and dot-dash lines show the function from the right side of the equation for  $f = 0.05$ ,  $f = 0.5$  and  $f = 1.0$  correspondingly

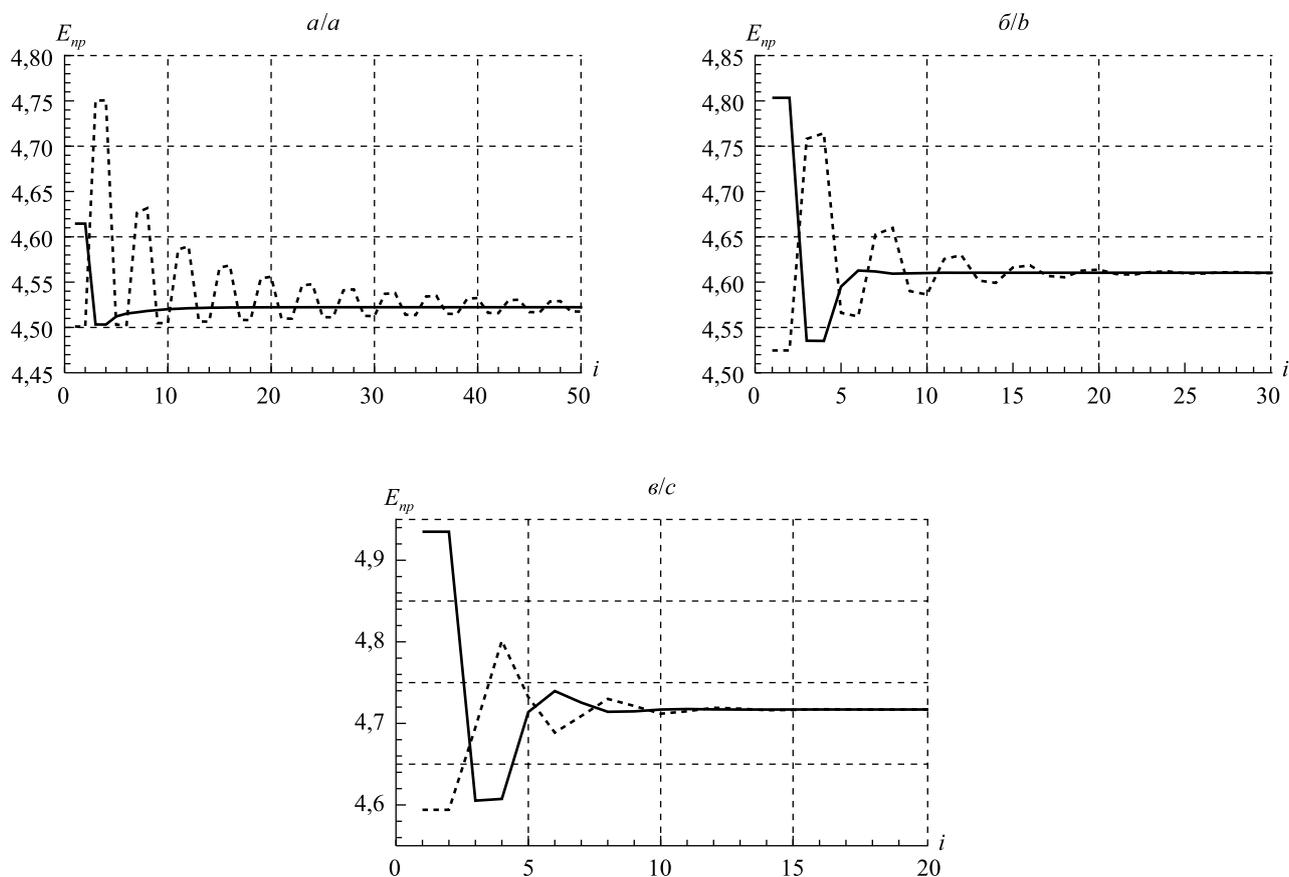


Рис. 2. Зависимость энергии КМР от номера итерации при  $n = 5$ ,  $p = +1$ ,  $\Delta = 1,0$  и  $f = 0,01$  (а),  $f = 0,05$  (б),  $f = 0,1$  (в). Сплошной линии соответствует итерационная схема с параметром, определяемым из условия (13), штриховой линии – итерационная схема с параметром  $u = f$   
 Fig. 2. Dependence of the energy of the Rabi model for  $n = 5$ ,  $p = +1$ ,  $\Delta = 1.0$  and  $f = 0.01$  (a),  $f = 0.05$  (b),  $f = 0.1$  (c) on the iteration number: solid line corresponds to the iteration scheme with the parameter given by condition (13), dashed line corresponds to the iteration scheme with the parameter  $u = f$

На рис. 3 приведено сравнение точного численного решения при  $n = 5, p = \pm 1, \Delta = 1,0$  с нулевым приближением ОМ для обоих способов определения свободного параметра как функции константы связи. Необходимо отметить, что нулевое приближение при выборе  $u = f$  более точно повторяет качественные особенности численного решения. Некоторое отклонение нулевого приближения при выборе параметра  $u$  из условия (13) может быть обусловлено тем, что на отдельных участках тангенс угла наклона прямой из правой части выражения (13) становится сравнимым с тангенсом угла наклона касательной к осциллирующей части. Поэтому в таких местах возможно более резкое изменение свободного параметра при равномерном изменении константы связи. Тем не менее уже после первой итерации происходит полное восстановление качественного и количественного поведения, что можно видеть на рис. 4.

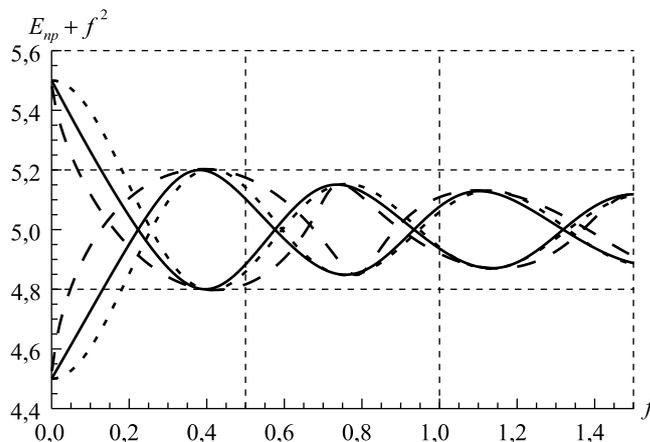


Рис. 3. Зависимость энергии КМР при  $n = 5, p = \pm 1, \Delta = 1,0$  от константы связи: сплошной линии соответствует точное численное решение, штриховой – нулевое приближение ОМ при выборе  $u$  из условия (13), пунктирной – нулевое приближение ОМ при  $u = f$

Fig. 3. Dependence of the energy of the Rabi model for  $n = 5, p = \pm 1, \Delta = 1.0$  on the coupling constant: the solid line corresponds to the exact numerical solution, dashed line – to zeroth order approximation of OM with  $u$  given by condition (13), dot-dash line – to zeroth order approximation of OM with  $u = f$

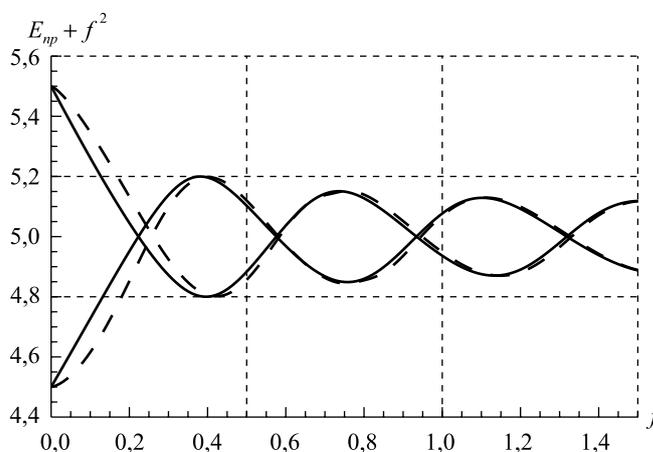


Рис. 4. Зависимость энергии КМР при  $n = 5, p = \pm 1, \Delta = 1,0$  от константы связи: сплошной линии соответствует точное численное решение, штриховой – значение энергии после первой итерации при выборе  $u$  из условия (13)

Fig. 4. Dependence of the energy of the Rabi model for  $n = 5, p = \pm 1, \Delta = 1.0$  on the coupling constant: the solid line corresponds to the exact numerical solution, dashed line – to energy value after the first iteration with  $u$  given by (13)

### Заключение

Рассмотрен вопрос о сходимости итерационной схемы ОМ для КМР при различных способах выбора свободного параметра. Показано, что значение последнего, определяемое из условия зануления ближайшего к диагональному нетривиального матричного элемента гамильтониана, при слабых константах связи ДУС с полем приводит к значительному увеличению скорости сходимости итерационной

схемы ОМ по сравнению с итерационной схемой для  $u = f$ . В то же время нулевое приближение ОМ с параметром  $u = f$  качественно лучше повторяет поведение численного решения. Тем не менее уже в первой итерации ОМ при выборе параметра из условия (13) происходит восстановление качественного и в значительной степени количественного поведения собственных значений энергии КМР.

Предложенный метод оптимального выбора параметра для численного решения уравнения Шрёдингера для КМР представляет большой интерес при исследовании поведения атомных систем в сильном резонансном поле [15; 16] и для других приложений ОМ.

### Библиографические ссылки / References

1. Feranchuk I, Ivanov A, Le V-H, Ulyanenko A. *Non-perturbative description of quantum systems*. Heidelberg: Springer; 2015.
2. Feranchuk ID, Komarov LI. The operator method of the approximate description of the quantum and classical systems. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1984;17(16):3111–3133. DOI: 10.1088/0305-4470/17/16/014.
3. Feranchuk ID, Hai LX. Analytical estimation of the energies and widths of the Rydberg states of a hydrogen atom in an electric field. *Physics Letters A*. 1989;137:385–388. DOI: 10.1016/0375-9601(89)90910-9.
4. Feranchuk ID, Komarov LI, Nichipor IV, Ulyanenko AP. Operator method in the problem of quantum anharmonic oscillator. *Annals of Physics*. 1995;238(2):370–440. DOI: 10.1006/aphy.1995.1025.
5. Fernandez FM, Castro EA. An analytic approximate expression for eigenvalues of the bounded quartic oscillator. *Physics Letters A*. 1982;88(1):4–6. DOI: 10.1016/0375-9601(82)90409-1.
6. Fernandez FM, Castro EA. Comment on the operator method and perturbational solution of the Schrödinger equation. *Physics Letters A*. 1982;91(7):339–340. DOI: 10.1016/0375-9601(82)90427-3.
7. Fernandez FM, Meson AM, Castro EA. Convergent perturbation series for coupled oscillators. *Physics Letters A*. 1985;112(3–4):107–110. DOI: 10.1016/0375-9601(85)90667-X.
8. Skoromnik OD, Feranchuk ID. Analytic approximation for eigenvalues of a class of PT-symmetric Hamiltonians. *Physical Review A*. 2017;96:052102. DOI: 10.1103/PhysRevA.96.052102.
9. Feranchuk ID, Komarov LI, Ulyanenko AP. Two-level system in a one-mode quantum field: numerical solution on the basis of the operator method. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1996;29:4035–4047. DOI: 10.1088/0305-4470/29/14/026.
10. Feranchuk ID, Leonov AV. Strong field effects in the evolution of a two-level system. *Physics Letters A*. 2011;375(3):385–389. DOI: 10.1016/j.physleta.2010.11.009.
11. Feranchuk ID, Leonau AU, Eskandari MM. Spontaneous emission in a quantum system driven by a resonant field beyond the rotating wave approximation. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2017;50:105501. DOI: 10.1088/1361-6455/aa68c5.
12. Skoromnik OD, Feranchuk ID, Leonau AU, Keitel CH. Analytic model of a multi-electron atom. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2017;50:245007. DOI: 10.1088/1361-6455/aa92e6.
13. Rabi I. Space Quantization in a Gyration Magnetic Field. *Physical Review*. 1937;51:652–654. DOI: 10.1103/PhysRev.51.652.
14. Feranchuk ID, Leonov AV, Skoromnik OD. Physical background for parameters of the quantum Rabi model. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2016;49:454001. DOI: 10.1088/1751-8113/49/45/454001.
15. Zhang Y-Y, Chen X-Y. Analytical solutions by squeezing to the anisotropic Rabi model in the nonperturbative deep-strong-coupling regime. *Physical Review A*. 2017;96:063821. DOI: 10.1103/PhysRevA.96.063821.
16. Saiko AP, Markevich SA, Fedaruk R. Emission Spectrum of a Qubit under Its Deep Strong Driving in the High-Frequency Dispersive Regime. *JETP Letters*. 2018;107(2):129–133. DOI: 10.1134/S0021364018020030.

Статья поступила в редакцию 12.07.2018.  
Received by editorial board 12.07.2018.