

УДК 519.68:[519.1+519.6], 51-72:530.145

**Н.А.Чеканов, И.Н.Беляева****РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА  
ДЛЯ ОДНОМЕРНЫХ АНГАРМОНИЧЕСКИХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ***Белгородский государственный университет*

The analytically-numerical method of the solution of one-dimensional Shroedinger's equation is offered in the article. By means of this method in MAPLE environment was solved one-dimensional Shroedinger's equation for anharmonic oscillator with 4, 6, 8-th degrees of nonlinearity, and also for symmetric anharmonic oscillator with two local minima. The obtained results are well consistend with other data.

**Введение**

Точные решения уравнения Шредингера имеют только для некоторых частных видов потенциальной функции, поэтому разработаны и применяются различные приближенные методы. К наиболее часто используемым приближениям относятся: метод диагонализации [1], квазиклассический метод [2], различные варианты теории возмущений [3], метод конечных элементов [4], непрерывный аналог метода Ньютона [5], метод нормальных форм [6], так называемое  $1/N$  разложение [7], метод осцилляторного представления [8], вариационные и операционные методы [9-11], симплектический метод [12], метод теории суперсимметрии [13], метод детерминантов Хилла [14].

В настоящей работе предложен аналитически-численный метод, основанный на нахождении линейно независимых решений задачи Коши по методу Фробениуса [15] в виде степенных рядов, с помощью которых решается исходная краевая задача для уравнения Шредингера.

Предложенным методом в среде MAPLE решается одномерное уравнение Шредингера для ангармонического осциллятора с четвертой, шестой и восьмой степенями нелинейности, а также для симметричного ангармонического осциллятора с двумя локальными минимумами. Отметим, что ангармоническому осциллятору, особенно с четвертой степенью нелинейности, посвящено огромное число работ (см., напр., [3,8,10,14,16]). Это связано с тем, что несмотря на кажущуюся простоту эта модель, с одной стороны, имеет полезные приложения в атомной и молекулярной физике, в квантовой теории поля, в теории твердого тела, а с другой стороны, не имеет общего решения для собственных значений и функций, поэтому является испытательным тестом для проверки новых приближенных методов решения задачи на собственные значения. Причина сложности нахождения спектра и волновых функций ангармонического осциллятора в том, что он имеет неизолированную особую точку по параметру нелинейности, если рассматривать его в комплексной энергетической плоскости [16].

**1. Общая схема метода**

Пусть дано уравнение

$$\psi''(x) + F(x, E)\psi(x) = 0, \quad F(x, E) = 2(E - V(x)), \quad (1)$$

где функция  $V(x)$  может иметь полюс не выше второго порядка в окрестности точки  $x = x_0$ , которое надо решить на собственные значения  $E$  с заданными граничными условиями на конечном или бесконечном интервале с квадратично интегрируемой функцией  $\psi(x)$ .

Для решения задачи (1) вначале находим два линейно независимых решения  $y_1(x)$  и  $y_2(x)$  задачи Коши

$$y''(x) + F(x, E)y(x) = 0 \quad (2)$$

со следующими начальными условиями

$$\begin{cases} y_1(x_0) = 1, & y_2(x_0) = 0, \\ y_1'(x_0) = 0, & y_2'(x_0) = 1. \end{cases} \quad (3)$$

Если функция  $V(x)$  не содержит особенностей, то решения  $y_1(x)$  и  $y_2(x)$  ищем в виде следующих степенных рядов:

$$y_1(x, E) = 1 + \sum_{k=2}^{\infty} c_k^{(1)}(x - x_0)^k, \quad (4)$$

$$y_2(x, E) = x - x_0 + \sum_{k=2}^{\infty} c_k^{(2)}(x - x_0)^k,$$

которые автоматически удовлетворяют начальным условиям (3). Коэффициенты  $c_k^{(1)}$ ,  $c_k^{(2)}$  определяются единственным образом посредством подстановки ряда (4) в уравнение (2) и приравнянием к нулю коэффициентов при различных степенях независимой переменной в левой части полученного равенства.

При наличии полюсов не выше второго в точке  $x = x_0$  вид решений (4) будет иным в зависимости от корней определяющего уравнения (см., напр., [15]). Из теории обыкновенных дифференциальных уравнений известно: для того, чтобы уравнение, в частности, вида (1) имело в окрестности особой точки  $x = x_0$  хотя бы одно частное решение в виде обобщенного степенного ряда

$$y(x) = (x - x_0)^\rho \sum_{k=0}^{\infty} c_k (x - x_0)^k, \quad c_0 \neq 0, \quad \rho = \text{const}, \quad (5)$$

достаточно, чтобы это уравнение имело вид

$$y''(x) + \frac{\sum_{k=0}^{\infty} f_k (x - x_0)^k}{(x - x_0)^2} y(x) = 0, \quad (6)$$

где  $\frac{\sum_{k=0}^{\infty} f_k (x - x_0)^k}{(x - x_0)^2} = F(x, E)$ .

Для получения решения уравнения (6) в виде обобщенного степенного ряда (5) необходимо найти показатель  $\rho$  из определяющего уравнения

$$\rho(\rho - 1) + f_0 = 0 \quad (7)$$

и коэффициенты  $c_k$ , а также вид второго линейно независимого решения.

Пусть  $\rho_1$  и  $\rho_2$  есть корни уравнения (7) и  $\rho_1 \geq \rho_2$ . Тогда если корни определяющего уравнения различны, но их разность  $\rho_1 - \rho_2$  не равна целому положительному числу, то два линейно независимых решения имеют вид

$$y_1(x, E) = (x - x_0)^{\rho_1} \sum_{k=0}^{\infty} c_k^{(1)}(x - x_0)^k, \quad c_0^{(1)} \neq 0, \quad (8)$$

$$y_2(x, E) = (x - x_0)^{\rho_2} \sum_{k=0}^{\infty} c_k^{(2)}(x - x_0)^k, \quad c_0^{(2)} \neq 0.$$

Коэффициенты  $c_k^{(1)}$  и  $c_k^{(2)}$  определяются подстановкой рядов (8) в уравнение (6) после предварительного умножения обеих частей его на  $(x - x_0)^2$ . При этом коэффициенты  $c_0^{(1)}$  и  $c_0^{(2)}$  остаются произвольными, положим их равными единице.

Если  $\rho_1 - \rho_2$  есть целое положительное число, то одно решение, соответствующее корню  $\rho_1$ , по-прежнему имеет вид

$$y_1(x, E) = (x - x_0)^{\rho_1} \sum_{k=0}^{\infty} c_k^{(1)}(x - x_0)^k, \quad c_0^{(1)} = 1, \quad (9)$$

а второе линейно независимое решение определяется следующим рядом [15]:

$$y_2(x, E) = (x - x_0)^{\rho_2} \sum_{k=0}^{\infty} c_k^{(2)}(x - x_0)^k + \xi_{-1} y_1(x, E) \ln(x - x_0). \quad (10)$$

Если случится, что  $\xi_{-1} = 0$ , то второе линейно независимое решение будет иметь вид обобщенного степенного ряда.

В случае  $\rho_1 - \rho_2 = 0$  одно частное решение имеет вид (9), а второе линейно независимое решение имеет вид (10), но при этом коэффициент  $\xi_{-1} \neq 0$ .

Как известно, решение уравнения (2) находится по формуле

$$y(x) = C_1 y_1(x) + C_2 y_2(x), \quad (11)$$

где  $C_1$  и  $C_2$  — произвольные постоянные, которые определяются из начальных условий (3).

Согласно условиям исходной краевой задачи ее собственные значения  $E$  и собственные функции  $\psi(x)$  определяются из следующей однородной системы алгебраических уравнений

$$\begin{cases} C_1(E) \cdot \psi_1(-R, E) + C_2(E) \cdot \psi_2(-R, E) = 0, \\ C_1(E) \cdot \psi_1(+R, E) + C_2(E) \cdot \psi_2(+R, E) = 0. \end{cases} \quad (12)$$

Нетривиальное решение этой системы определяется из равенства

$$D(R, E) = \begin{vmatrix} \psi_1(-R, E) & \psi_2(-R, E) \\ \psi_1(+R, E) & \psi_2(+R, E) \end{vmatrix} = 0, \quad (13)$$

которое выполняется не при всех, а при определенных значениях энергии  $E_n$ , составляющих энергетический спектр уравнения Шредингера (1). Для построения волновых функций  $\psi_n(x, R)$  необходимо решить однородную линейную систему

$$\begin{cases} C_1(E_n) \cdot \psi_1(-R, E_n) + C_2(E_n) \cdot \psi_2(-R, E_n) = 0, \\ C_1(E_n) \cdot \psi_1(+R, E_n) + C_2(E_n) \cdot \psi_2(+R, E_n) = 0 \end{cases} \quad (14)$$

относительно  $C_1(E_n)$ ,  $C_2(E_n)$  и удовлетворить условию нормировки  $\int_{-R}^R \psi_n^2 dx = 1$ . Волновые функции представляются аналитически в виде степенных рядов с заданным числом членов  $N$ .

Нами разработан алгоритм и составлена численно-аналитическая программа EWA на MAPLE. Для проверки достоверности результатов, полученных этим методом, было проведено тестирование программы EWA для потенциальной функции  $V(x)$  в уравнении (1) с бесконечными стенками (А) и гармонического осциллятора (Б). В случае (А) первые десять уровней совпадают с точными значениями  $E_n = \pi^2 n^2 / 8R^2$ ,  $n = 1, \dots, 10, \dots$  с девятью знаками после десятичной запятой, если взять  $N = 68$  и  $R = 1$ . В случае (Б) при значениях  $N = 138$  и  $R = 5,9$  относительная погрешность  $\epsilon$  вычисленного десятого уровня составляет 0,004% от точного его значения  $E_n = n + 1/2$ ,  $n = 0, 1, \dots$ . Максимальная абсолютная разность между точной и вычисленной волновой функцией для  $x \in [-R, R]$  при  $n = 3$  в случае (Б) менее  $10^{-9}$ . Заметим, что точность расчетов зависит от числа  $N$  и от величины  $R$ , выбором их значений эту точность можно повысить.

## 2. Ангармонический осциллятор с нелинейностью четвертой, шестой и восьмой степени

Приведенный выше метод был применен для вычисления энергетических уровней и волновых функций ангармонического осциллятора с нелинейно-

стью четвертой, шестой и восьмой степени, для которого в уравнении (1) потенциальная функция равна

$$V(x) = \frac{x^2}{2} + \alpha x^\mu,$$

где  $\mu = 4, 6, 8$ ,  $\alpha > 0$  — параметр нелинейности.

При помощи программы EWA для уравнения Шредингера (1) с функциями (15) найдены волновые функции в виде степенных рядов и энергетические спектры  $E_{EWA}$ , представленные в табл.1.

Как отмечалось выше, поведение определителя  $D(R, E)$  (см. формулу (13)), а следовательно, и нахождение корней уравнения  $D(R, E)$ , сильно зависит от числа удерживаемых членов  $N$  степенного ряда и от значения  $R$ . При увеличении числа членов ряда численное значение корней уравнения  $D(R, E)$  приближается к истинному значению, если нужным образом увеличивать  $R$ .

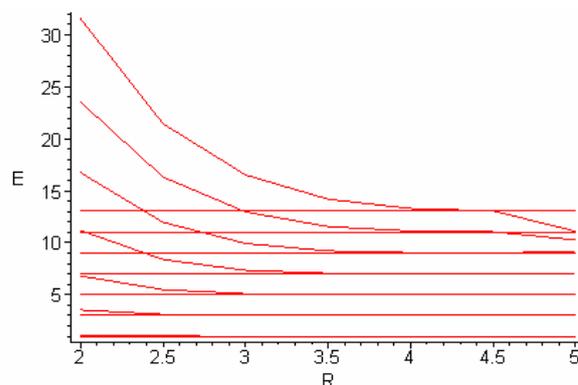


Рис.1. Зависимость энергетического спектра от значений  $R$

Таблица 1

Сравнение полученных уровней энергии  $2E_{EWA}$  с их значениями  $2E_{\text{exact}}$  [17] для разных степеней  $\mu$  и значений параметра  $\alpha$

$\mu = 4; \alpha = 0,5; R = 3,1; N = 116$			
n	$2E_{EWA}$	$2E_{\text{exact}}$	$\epsilon, \%$
0	1,392351642	1,392351641	0,000000072
1	4,648812722	4,648812704	0,000000038
2	8,655050136	8,655049957	0,0000020
3	13,156805217	13,156803898	0,000010
4	18,057565496	18,057557436	0,000045
5	23,297483839	23,297441451	0,00018
$\mu = 6; \alpha = 0,05; R = 3,5; N = 162$			
0	1,10908707841	1,10908707846	0,0000000045
1	3,59603692264	3,59603692122	0,000000039
2	6,64439172340	6,64439170865	0,00000022
3	10,23787347712	10,23787372142	0,0000023
4	14,30703798517	14,30704004612	0,000014
5	18,80178850141	18,80175833335	0,00016
$\mu = 8; \alpha = 0,00005; R = 4,6; N = 108$			
0	1,00064637110754	1,00064636987407	0,00000012
1	3,00572693430237	3,00572695535121	0,00000070
2	5,02539465930273	5,02539496908781	0,0000061
3	7,07668039755110	7,07666897260277	0,00016
4	9,18033757026787	9,18025674010691	0,00088
5	11,3565901021421	11,3561544132933	0,0038

при = =

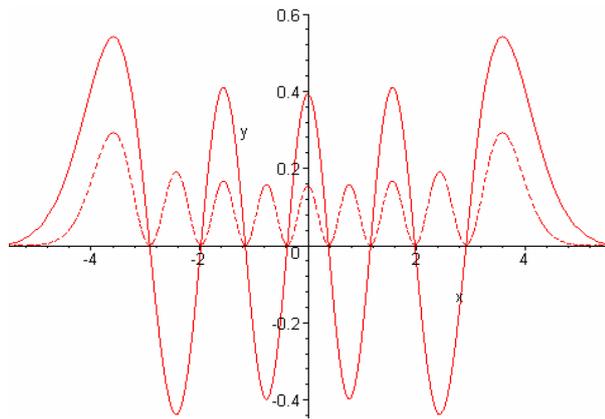


Рис.2. Волновая функция (сплошная линия) и (штрих-пунктир) в случае = , = и энергии  $2E_8 = 17,1078$

### 3. Ангармонический осциллятор с двумя минимумами

Нами вычислены также энергетический спектр и волновые функции для ангармонического осциллятора с двумя минимумами, потенциальная функция которого имеет вид

$$V(x) = \alpha(x^2 - a^2)^2, \quad (16)$$

где  $\alpha > 0$  — параметр нелинейности,  $a$  — параметр, определяющий положение двух минимумов.

В этом случае при помощи программы EWA найдены волновые функции для уравнения Шредингера (1) в виде степенных рядов и энергетические спектры при разных значениях параметров  $\alpha$ ,  $a$  и различных  $N$ . Полученные значения для нижайших энергетических уровней ангармонического осциллятора с двумя минимумами (16) показаны на рис.3 и приведены в табл.2, где они сравниваются с результатами работы [9].

Таблица 2  
Энергетический спектр гамильтониана (1) с потенциальной функцией (16) при  $a = \sqrt{2}$ ,  $\alpha = 1$ ,  $R = 3,4$ ,  $N = 180$

$n$	$E_{EWA}$	$E_{JA}$ [9]	$\epsilon, \%$
0	1,80081349	1,80081349	0
1	1,89650538	1,89650538	0
2	4,37046673	4,37046673	0
3	5,57335024	5,5733520	0,0000007
4	7,65142527	—	—
5	9,92036057	—	—

Были также вычислены энергетический спектр (табл.3) и волновые функции для ангармонического осциллятора с двумя минимумами с потенциальной функцией

$$V(x) = -x^2 + \frac{1}{4}x^4. \quad (17)$$

Полученные результаты сравниваются с результатами

работы [10].

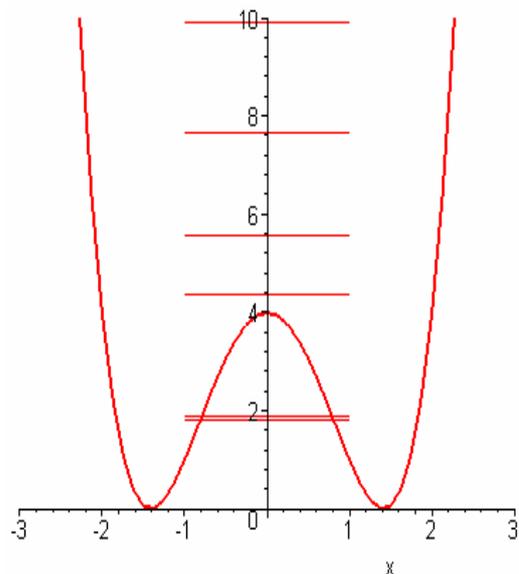


Рис.3. Структура энергетических уровней уравнения Шредингера (1) в потенциале с двумя минимумами (16) с параметрами  $a = \sqrt{2}$ ,  $\alpha = 1$

Таблица 3  
Энергетический спектр гамильтониана (1) с потенциальной функцией (17) при  $N = 116$ ,  $R = 3,7$

$n$	$E_{EWA}$	$E_{SN}$ [10]
0	-0,299521302	-0,299521367
1	0,046371670	0,046371082
2	1,227973957	—
3	2,459861283	—
4	3,938317733	—
5	5,581833988	—

### Вывод

Предложенным аналитически-численным методом получено решение краевой задачи для ангармонических осцилляторов. При сравнении полученных результатов с имеющимися в литературе найдено хорошее согласие.

Авторы глубоко признательны профессору И.В.Пузынину и участникам его семинара за плодотворное и полезное обсуждение.

Работа частично поддержана грантом БелГУ (№ВКГ-003-04).

1. Уилкинсон Дж., Райнш К. Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра. М.: Машиностроение, 1976. 392 с.
2. Маслов В.П., Федорук М.В. Квазиклассические приближения для уравнений квантовой механики. М.: Наука, 1976. 292 с.
3. Fernandez M.F. // J. Phys. A: Math. Gen. 2006. V.39. P.1683-1689.
4. Abrashkevich A.G., Abrashkevich D.G., Kaschiev M.S., Puzynin I.V. // Comp. Phys. Commun. 1995. V.85. P.65-74.
5. Пузынин И.В. и др. // ФЭЧАЯ. 1999. Т.30. Вып.1. С.210-265.
6. Swimm R.T., Delos J.B. // J. Chem. Phys. 1979. V.71.

- 
- P.1706-1716.
  7. Tang A.Z. and Chan F.T. // Phys. Rev. A35. 1987. No.2. P.911-914.
  8. Dineykan M. and Efimov G.V. // Repots of Math. Phys. 1995. V.6. No.2/3. P.287-308.
  9. Jafarpour M., Afshar D. // J. Phys. A: Math. Gen. 2002. V.35. P.87-92.
  10. Van der Straeten E. and Naudts J. // J. Phys. A: Math. Gen. 2006. V.39. P.933-940.
  11. Ivanov I.A. // J. Phys. A: Math. Gen. 1998. V.31. P.6995-7003.
  12. Liu X.S., Su L.W., Ding P.Z. // Intern. J. Quantum Chem. . 2002. V.87. P.1-11.
  13. Adhikari R., Dutt R. // Phys. Lett. A141. 1989. No.1,2. P.1-8.
  14. Chaudhuri R.N. and Mondal M. // Phys. Rev. A52. 1995. No.3. P.1850-1856.
  15. Трикоми Ф. Дифференциальные уравнения. М.: ИЛ, 1962. 352 с.
  16. Bender C.M. and Wu T.T. // Phys. Rev. 1969. V.184. No.5. P.1231-1260.
  17. Banerjee B.K. // Proc. R. Soc. Lond. A.364. 1978. P.265-275.