

ФЭИ-749

ФИЗИКО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

В. С. МАСТЕРОВ, А. А. СЕРЕГИН

All

**ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР
ОБОБЩЕННОГО ОСЦИЛЛЯТОРА**

Обнинск — 1977

ЭИ-749

ФИЗИКО - ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

В.С.Мастеров, А.А.Сергян

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ОБОБЩЕННОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Обнинск - 1977

УДК 539.145

М - 17

АННОТАЦИЯ

В квазиклассическом приближении (метод Цваана) находится энергетический спектр уровней обобщенного осциллятора $V(x) = \frac{a}{2} x^{2m}$. Результаты для $m \geq 2$ сравниваются с результатами расчета по методу ВРБ и с другими численными методами. Оценивается вклад от комплексных точек поворота.

1. В настоящее время существуют два приближенных метода нахождения квазиклассических решений уравнения Шредингера. Первый метод - метод Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна (ВКБ) - хорошо известен и изложен во всех учебниках по квантовой механике. Второй метод, основанный на работе Цваана [1] (метод Цваана) и усовершенствованный Кемблом [2], Хедингом [3], Покровским, Халатниковым [4] и Пономаревым [5], менее известен. Основное отличие этих методов состоит в том, что в методе ВКБ квазиклассические решения по обе стороны от точки поворота сшиваются на действительной оси, с привлечением точного решения вблизи самой точки поворота. В методе Цваана квазиклассические решения по обе стороны от точки поворота аналитически продолжают в комплексную плоскость z и сшиваются, обходя точку поворота в комплексной плоскости, с учетом явления Стокса. Это позволяет в методе Цваана естественным образом рассматривать как действительные (метод ВКБ) так и комплексные точки поворота. Последнее особенно важно при рассмотрении надбарьерного отражения и других поправок, связанных с комплексными точками поворота.

В данной работе мы, используя метод Цваана, найдем энергетический спектр обобщенного гармонического осциллятора $V(x) = \frac{a}{2} x^{2m}$ для $m = 2, 3, 4, 5, 6$. Интерес к этой задаче вызван несколькими причинами. В последние годы возрос интерес к исследованию движения частицы в одномерной полиномиальной потенциальной яме, имеющей минимум конечной глубины [6-9]. Данная задача является своеобразным "полигоном" для испытания приближенных методов решения дифференциальных уравнений. При решении этой задачи мы сможем оценить вклад комплексных точек поворота.

2. Рассмотрим уравнение Шредингера, описывающее движение частицы в поле $V(x) = \frac{a}{2} x^{2m}$ с $a > 0$,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \psi''(x) + \frac{a}{2} x^{2m} \psi(x) = E \psi(x). \quad (1)$$

Сделаем замену переменных $x = \left(\frac{\hbar^2}{\mu a}\right)^{\frac{1}{2m+2}} z$ и перепишем уравнение (1) в безразмерных переменных

$$\psi''(z) + \rho^2(z) \psi(z) = 0. \quad (2)$$

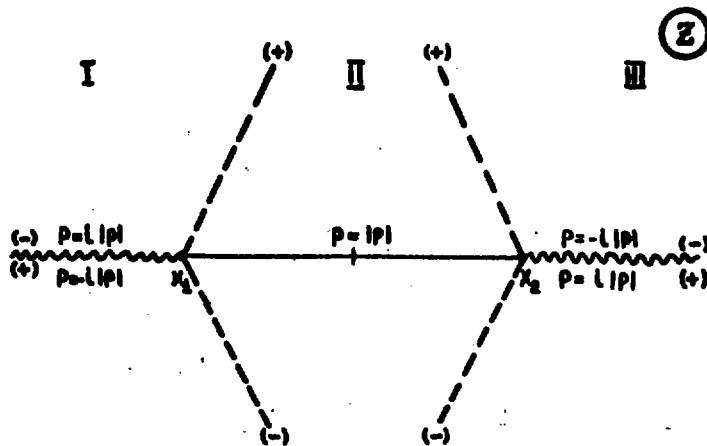


Рис. 1. Комплексная плоскость z для $m=1$: пунктирная линия (+) или (-) — линии Стокса; волнистые линии — разрывы; сплошная линия — действительная ось, x_1, x_2 — точки поворота.

Здесь $\rho(z)$ — импульс в безразмерных единицах, который равен:

$$\rho(z) = \sqrt{2(\epsilon - \frac{1}{2}z^{2m})}, \quad (3)$$

а $\epsilon = \frac{\mu E}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2}{\mu a} \right)^{\frac{2}{2m+2}}$ — энергия в безразмерных единицах.

Применение метода Цванга требует аналитического продолжения импульса $\rho(z)$ в комплексную плоскость z и выполнения следующих операций, описанных в [5]: нахождение точек поворота из решения уравнения $\rho(z) = 0$; проведение разрывов в комплексной плоскости z , с тем, чтобы сделать импульс однозначным; построение линий Стокса в окрестностях точек поворота, которые делят всю комплексную плоскость на сектора. Типичные виды комплексных плоскостей; получавшихся в нашей задаче, приводятся на рис. 1-3.

Начнем с нахождения энергетического спектра частицы в поле с $m=1$. В этом случае имеются только две действительные точки поворота $x_{1,2} = \pm \sqrt{2\epsilon}$ и комплексная плоскость z изображена на рис. 1. Согласно методу Цванга нам нужно затухающее на действи-

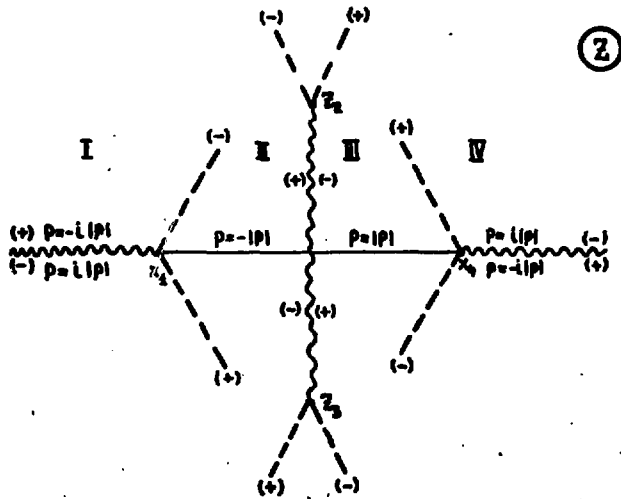


Рис. 2. Комплексная плоскость z для $m=2$.
 Обозначения те же, что и на рис. I.

тельной оси решение ψ_2^- справа от точки x_2 продолжить по известным правилам, не пересекая разрез, через линии Стокса на действительную ось в область слева от точки x_1 . Этот случай детально рассмотрен в работе [5], где показано, что получается хорошо известное условие для нахождения энергетического спектра

$$\cos \omega = 0, \tag{4}$$

откуда

$$\omega = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2(\varepsilon - 1/2 x^2)} dx = \pi(n + 1/2),$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$.

В поле с $m=2$, импульс $p(z)$ имеет две действительные $x_{1,4} = \pm (2\varepsilon)^{1/4}$ и две сопряженные комплексные $z_{2,3} = \pm i (2\varepsilon)^{1/4}$ точки поворота. Соответствующая комплексная плоскость z изображена на рис. 2. Так же, как и в предыдущем случае, нам нужно продолжить затухающее на действительной оси решение ψ_4^- справа от x_4 на действительную ось в область слева от x_1 . Выполнив

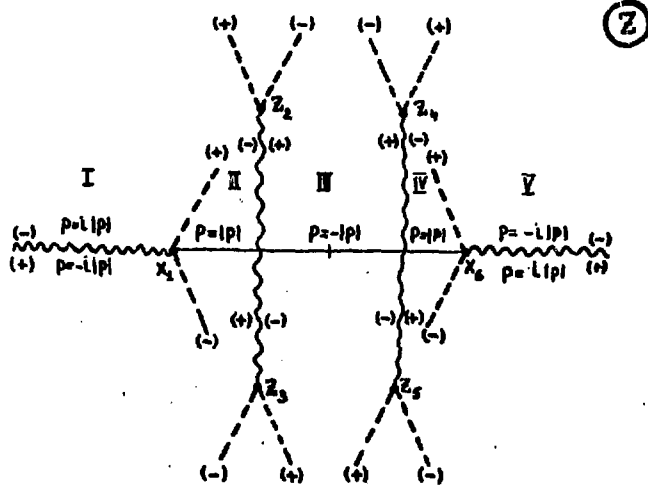


Рис. 3. Комплексная плоскость z для $m=3$.
 Обозначения те же, что и на рис. 1.

эту процедуру, мы найдем связь между решениями в I и IV областях

$$\Psi_4^- = \left(e^{-\delta} + g e^{2i\omega} \right) \Psi_1^+ + 2i \frac{(g \cos 2\omega + e^{-\delta}) \Psi_1^-}{(2\varepsilon)^{1/2}} \quad (5)$$

где $\delta = \int_0^{\lambda_4} \sqrt{2(\varepsilon - \frac{1}{2}x^4)} dx$; $g = \sqrt{1 + e^{-2\delta}}$; $\omega = \int_0^{\lambda_4} \sqrt{2(\varepsilon - \frac{1}{2}x^4)} dx$.

По условию задачи на действительной оси слева от x_1 существует только затухающее решение Ψ_1^+ . Приравняв нулю коэффициент при решении Ψ_1^- , получим условие для определения уровней энергии

$$\cos 2\omega = -e^{-\delta}/g, \quad (6)$$

откуда

$$2\omega = \int_{x_1}^{\lambda_4} \sqrt{2(\varepsilon - \frac{1}{2}x^4)} dx = \pi(n + \frac{1}{2}) + (-1)^n \arcsin(e^{-\delta}/g). \quad (7)$$

Из полученного выражения видно, что в отличие от метода ВКБ в уравнении (6) появляется поправка. Так как с увеличением ε увеличивается и δ , то поправка существенна только для основного состояния.

В потенциальном поле с $m=3$ импульс $p(z)$ имеет шесть то-

чек поворота. Из них две действительные точки поворота $x_{2,6} = \pm(2\varepsilon)^{1/6}$ и две пары сопряженных комплексных точек поворота $z_{2,3} = \frac{1}{2}(2\varepsilon)^{1/6}(-1 \pm i\sqrt{3})$, $z_{4,5} = \frac{1}{2}(2\varepsilon)^{1/6}(1 \pm i\sqrt{3})$. Комплексная плоскость z для этого случая изображена на рис. 3. Как и в предыдущем случае нам нужно считать затухающее на действительной оси решение ψ_6^- справа от точки x_6 с решением на действительной оси слева от x_1

$$\begin{aligned} \psi_6^- = & \left\{ g_1 g_2 e^{i(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3)} + g_2 e^{-\delta_1 + i(-\omega_1 + \omega_2 + \omega_3)} + g_1 e^{-\delta_2 + i(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3)} \right. \\ & + e^{-\delta_1 - \delta_2 + i(\omega_1 - \omega_2 + \omega_3)} \left. \right\} \psi_1^- + 2i \left\{ g_1 g_2 \cos(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) + g_2 e^{-\delta_1} \cos(-\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) \right. \\ & \left. + g_1 e^{-\delta_2} \cos(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3) + e^{-\delta_1 - \delta_2} \cos(\omega_1 - \omega_2 + \omega_3) \right\} \psi_1^+ \end{aligned}$$

Приравняв нулю коэффициент при возрастающем решении на действительной оси в области слева от x_1 , получим условие для определения энергетических уровней

$$\cos(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) = -\frac{e^{-\delta_1}}{g_1} \cos(-\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) - \frac{e^{-\delta_2}}{g_2} \cos(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3) - \frac{e^{-\delta_1 - \delta_2}}{g_1 g_2} \cos(\omega_1 - \omega_2 + \omega_3). \quad (8)$$

Откуда, вводя $\Omega = \omega_1 + \omega_2 + \omega_3$, получим

$$\begin{aligned} \Omega = & \int_{x_1}^{x_6} \sqrt{2(\varepsilon - \frac{1}{2}x^6)} dx = \pi(n + 1/2) + \\ & (-1)^n \arcsin \left(\sum_{i=1}^2 \frac{e^{-\delta_i}}{g_i} \cos(\Omega - \sum_{k=1}^i \omega_k) + \frac{e^{-\delta_1 - \delta_2}}{g_1 g_2} \cos(\Omega - 2\omega_2) \right), \end{aligned} \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} \delta_i = & \left| 2i \int_0^{i\text{Im} z_i} \sqrt{2(\varepsilon - \frac{1}{2}x^6)} dx \right|; & g_i = & \sqrt{1 + e^{-2\delta_i}}; \\ \omega_1 = & \int_{x_1}^{\text{Re} z_2} p(z) dz; & \omega_2 = & \int_{\text{Re} z_2}^{\text{Re} z_4} p(z) dz; & \omega_3 = & \int_{\text{Re} z_4}^{x_6} p(z) dz. \end{aligned}$$

Таким образом, так же как и в поле с $m=2$, мы получили поправку, появляющуюся за счет учета комплексных точек поворота. Поправки в обоих случаях имеют одну и ту же энергетическую зависимость и, как уже отмечалось, существенны только для основного состояния.

Анализируя выражения (7) и (8), можно определить структуру их построения и записать общее выражение для поправки в поле с произ-

$$\begin{aligned} \cos \Omega = & - \sum_{i=1}^{m-1} \frac{e^{-\delta_i}}{g_i} \cos \left(\Omega - \sum_{k=1}^i \omega_k \right) - \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j>i}^{m-1} \frac{e^{-\delta_i - \delta_j}}{g_i g_j} \cos \left(\Omega - 2 \sum_{k=1}^j \omega_k \right) \\ & - \dots - \frac{e^{-\sum_{i=1}^{m-1} \delta_i}}{g_1 g_2 \dots g_{m-1}} \cos \left(\Omega - \sum_{k=1}^{m-1} 2 \omega_k \right). \end{aligned} \quad (10)$$

Легко проверить, что это выражение справедливо для $m = 1, 2, 3$ и 4. К сожалению, свернуть в компактное выражение или выполнить суммирование правой части (9) не представляется возможным.

3. В этом разделе мы сравним результаты численных расчетов энергетического спектра для $m = 2, 3, 4, 5$, рассчитанных по формуле (10), с результатами расчета другими методами. Для нашей цели представляют интерес три метода: метод ВКБ, метод ВКБ с привлечением теоремы вириала и численная диагонализация.

В методе ВКБ энергетический спектр обобщенного осциллятора определяется из условия

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2(\mathcal{E} - 1/2 x^{2m})} dx = \pi \left(n + 1/2 \right). \quad (11)$$

В работе (9) показано, что если привлечь теорему вириала, то в квазиклассическом приближении можно найти явное приближенное выражение для уровней энергии обобщенного осциллятора

$$\mathcal{E} = \left(n + 1/2 \right)^{\frac{2m}{1+m}} \quad (12)$$

Спектр обобщенного осциллятора можно рассчитать численно путем диагонализации гамильтониана (1). Для этого волновую функцию $\Psi(x)$ уравнения (1) раскладываем в ряд по волновым функциям гармонического осциллятора (т.е. решениям с $m = 1$). Увеличивая число членов разложения $\Psi(x)$, можно найти энергетический спектр с любой степенью точности. Результаты всех расчетов сведены в таблицу.

Сравнивая результаты расчетов, отметим, что наибольшая ошибка получается для энергии основного состояния и эта ошибка увеличивается с увеличением m . Однако величина ошибки в методе Цванга меньше, чем в методе ВКБ. Таким образом, учет комплексных точек поворота уменьшает величину ошибки. Так для поля с $m = 2$ величина ошибки уменьшается почти в три раза.

В заключение авторы благодарят А.П.Будника за возможность использовать в данной работе его программу.

Таблица

Энергетический спектр обобщенного осциллятора

	I	II	III	IV
2	0.3968	0.4336	0.4984	0.5302
	1.7171	1.8760	1.8712	1.8999
	3.3930	3.7070	3.7073	3.7325
	5.3140	5.8058	5.8058	5.8250
	7.4293	8.1168	8.1169	8.1350
3	0.3536	0.4004	0.4953	0.5724
	1.8371	2.0806	2.0950	2.1693
	3.9528	4.4768	4.4763	4.5366
	6.5479	7.4158	7.4157	7.4676
	9.5459	10.811	10.811	10.858
4	0.3299	0.3810	0.4841	0.6130
	1.9131	2.2094	2.2399	2.3784
	4.3322	5.0031	5.0086	5.1254
	7.4218	8.5713	8.5716	8.6811
	11.0953	12.814	12.814	12.930
5	0.3198	0.3682	0.4804	
	1.9654	2.2980	2.3479	
	4.6050	5.3839	5.3986	
	8.0683	9.4329	9.4361	
	12.2656	14.340	14.341	
6	0.3048	0.3593	0.4795	
	2.0039	2.3626	2.4270	
	4.8104	5.6716	5.6978	
	8.5642	10.097	10.106	
	13.1762	15.535	15.537	

Примечание: I - расчеты по формуле (12); II - расчеты по методу ВКБ, III - расчеты по методу Цванна, для $m = 4, 5, 6$ учитывались только члены пропорциональные $e^{-\delta_i/g_i}$; IV - численная диагонализация матрицы 20 x 20.

ЛИТЕРАТУРА

1. Zwaan A. Intensitäten im Ca-Funkenspektrum. Thesis, Utrecht, 1929.
2. Kemble E.C. The Fundamental Principles of Quantum Mechanics. Mc.-Graw-Hill, 1937.
3. Хединг Дж. Введение в метод фазовых интегралов. М., Мир, 1965.
4. Покровский В.Л., Халатников И.П. ЖЭТФ, 40, 1713, 1961.
5. Пономарев Л.И. Лекции по квазиклассике. Препринт ИТФ-53, Москва-1967 .
6. Bender C.M., Wu T.T. Phys. Rev., 184, 1231, 1969.
7. Graffe S., Grechi V., Turchetti G. Nuovo Cimento, 4B, 313, 1971.
8. Biswas S.N., Datta K. et al. J. Math. Phys. 14, 1190, 1973.
9. Будвик А.П., Гай Е.В., Работнов Н.С. Приближение Паде и задача об ангармоническом осцилляторе в квантовой механике. Препринт ФЭИ-583, 1975 .
10. Гольдман И.И., Кривченко В.Д. Сборник задач по квантовой механике. М., ГИИ, § 2, задача № 9, 1957.

ФЭИ-749. Т-12578 от 5.08.77 г. Объем 0,5 уч.-изд. л. Тираж III экз.
Индекс 3624. Цена 5 коп. Заказ № 560
Отпечатано на ротаприте ФЭИ, сентябрь 1977 г.



Цена 5 коп.

Индекс 3624