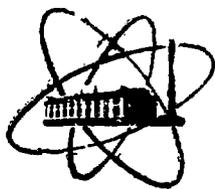


ФЭИ-772



ФИЗИКО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

SV 78 11/1977

В. С. МАСТЕРОВ, А. А. СЕРЕГИН

AL

**ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР
АНГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА**

Обнинск — 1977

ФЭИ-772

ФИЗИКО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

В.С.Мастеров, А.А.Серегин

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР
АНГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Обнинск - 1977

УДК-539.142

М-17

АННОТАЦИЯ

В квазиклассическом приближении (метод Цваана) находится энергетический спектр ангармонического осциллятора $V(x) = ax^4 + bx^2$. Результаты сравниваются с результатами расчета по методу ВКБ и численной диагонализации гамильтониана, что позволяет оценить вклад от комплексных точек поворота.

1. В настоящее время существуют два приближенных метода нахождения квазиклассических решений уравнения Шредингера: метод ВКБ (Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна) и метод Цваана. Если метод ВКБ хорошо известен и изложен во всех учебниках, то о методе Цваана известно мало, и он почти не применялся к решению задач. Метод Цваана основан на работе [1] и усовершенствован Кемблом [2], Хедингом [3], Покровским, Халатниковым [4] и приведен к виду, удобному для практического использования Пономаревым [5]. Основное отличие этих методов состоит в том, что в методе ВКБ квазиклассические решения по обе стороны от точки поворота сшиваются 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 с обходом точки поворота в комплексной области, учитывая явление 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 ангармонического осциллятора $V(x) = ax^4 + bx^2$. Интерес к этой задаче вызван несколькими причинами. Энергетический спектр частицы с такой потенциальной энергией практически нужен в квантовой химии [6]. В последние годы возрос интерес к исследованию частицы в одномерной полиномиальной яме, имеющей минимум конечной глубины [7-10]. Эти задачи являются настоящими "полигонами" для испытания приближенных методов решения дифференциальных уравнений. При решении задачи об ангармоническом осцилляторе мы сможем оценить точность метода и величину вклада от комплексных точек поворота.

2. Рассмотрим уравнение Шредингера с потенциальной энергией

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) + (ax^4 + bx^2) \Psi(x) = E \Psi(x), \quad (1)$$

где $a > 0$, а b может принимать как положительные так и отрицательные значения. Сделаем замену $x = (\hbar^2/ma)^{1/6} z$ и перепишем (I) в безразмерных переменных

$$\Psi''(z) + p^2(z)\Psi(z) = 0. \quad (2)$$

Здесь $p(z)$ - импульс в безразмерных единицах, который равен

$$p(z) = \sqrt{2(\xi - z^4 - \alpha z^2)},$$

где $\xi = (m^2/\hbar^4 a)^{1/3} E$ - энергия в безразмерных единицах, а $\alpha = (m/\hbar^4 a^2)^{1/3} b$. Из рис. I видно, что потенциальная энергия $V(z) = z^4 + \alpha z^2$ при отрицательных значениях α имеет два симметричных минимума. Отметим, что задача с потенциальной энергией, имеющей два минимума, рассматривалась в работе [II], в которой методом Цваана находился энергетический спектр двухатомной молекулы.

Применение метода Цваана требует построения аналитического продолжения импульса $p(z)$ в комплексную плоскость z и выполнения следующих операций, описанных в [5]: нахождение точек поворота из решения уравнения $p(z) = 0$; проведение разрезов в комплексной плоскости z с тем, чтобы сделать импульс однозначным; построение линий Стокса в окрестностях точек поворота, которые делят всю комплексную плоскость на сектора.

В нашей задаче в зависимости от α и ξ получаются три случая, соответствующих комплексных плоскостей. В первом случае, если $\alpha < 0$ и $\xi < 0$, все четыре точки поворота будут действительные $x_{1,4} = \pm \sqrt{-\frac{\alpha}{2} + \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} + \xi}}$ и $x_{2,3} = \pm \sqrt{\frac{\alpha}{2} - \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} + \xi}}$. Во втором случае, если $\alpha < 0$ и $\xi > 0$ или $\alpha > 0$ и $\xi > 0$, две точки поворота будут действительные $x_{1,4} = \pm \sqrt{-\frac{\alpha}{2} + \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} + \xi}}$ и две комплексно-сопряженные $x_{2,3} = \pm i \sqrt{\frac{\alpha}{2} + \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} + \xi}}$. В третьем случае, если $\alpha < 0$ и $\xi = 0$, все точки поворота действительные $x_{1,4} = \pm \sqrt{-\frac{\alpha}{2} + \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} + \xi}}$ и $x_{2,3} = 0$, но две из них - кратные. В каждом из этих случаев получается своя комплексная плоскость z , которые представлены на рис. 2.

Рассмотрение начнем с первого случая. Комплексная плоскость z вместе с разрезами и построенными линиями Стокса изображена на рис. 2а. Согласно методу Цваана нам нужно затухающее на действительной оси решение Ψ_4^- справа от x_4 продолжить по известным правилам, не пересекая разрезы, через линии Стокса на

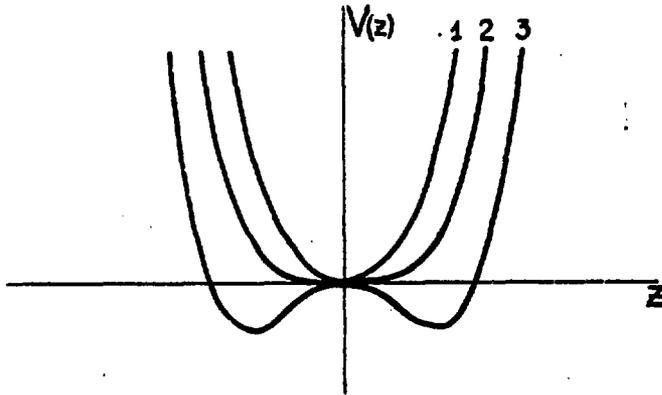


Рис. 1. Потенциальная энергия $V(z) = z^4 + \alpha z^2$ для различных значений α . 1. $\alpha = 2$; 2. $\alpha = 0$; 3. $\alpha = -2$.

действительную ось в область слева от точки x_1 . Тогда получим

$$\Psi_4^- = e^k (e^{-i\omega_2} + h e^{i\omega_2}) e^{i\omega_1} \Psi_1^+ + i e^k [(h e^{-i\omega_2} + e^{i\omega_2}) e^{-i\omega_1} + (e^{-i\omega_2} + h e^{i\omega_2}) e^{i\omega_1}] \Psi_1^-$$

где $k = \int_{x_2}^{x_3} p(z) dz$; $\omega_1 = \int_{x_1}^{x_2} p(z) dz$; $\omega_2 = \int_{x_3}^{x_4} p(z) dz$; $h = \sqrt{1 + e^{-2k}}$.

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

$$\operatorname{ctg} \omega_1 \cdot \operatorname{ctg} \omega_2 = \frac{h-1}{h+1} \quad (5)$$

Для того, чтобы пояснить полученную формулу, рассмотрим два предельных случая. Первый предельный случай получается при $K \rightarrow \infty$, т.е. барьер между ямами увеличивается. Тогда $h \rightarrow 1$, и получаем

$$\operatorname{ctg} \omega_1 = 0; \quad \operatorname{ctg} \omega_2 = 0$$

Таким образом, движение частицы в каждой яме происходит независимо.

Второй предельный случай получается при $K \rightarrow 0$, т.е. барьер между ямами исчезает. Тогда $h \rightarrow \sqrt{2}$, и частица движется одновременно в двух ямах.

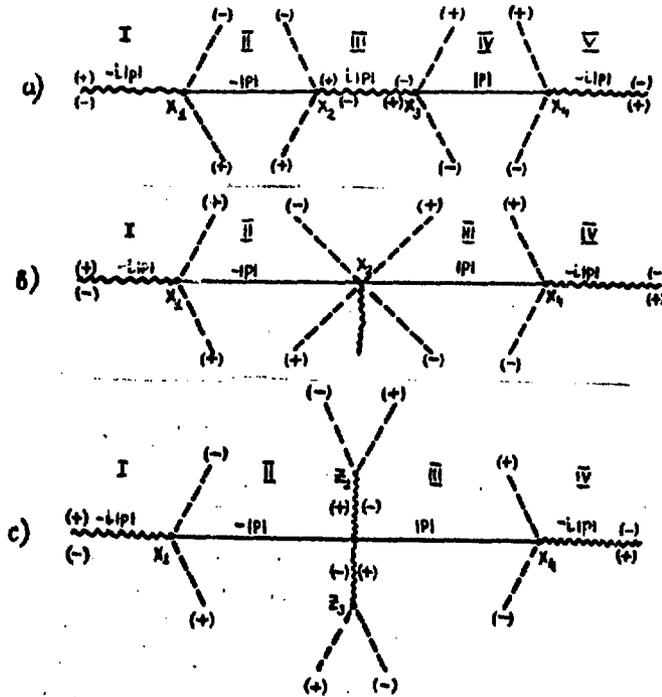


Рис. 2. Комплексные плоскости z для трех возможных случаев. Сплошная линия - действительная ось, пунктирные линии (+) или (-) - линии Стокса, волнистая линия - разрез.

Обратимся теперь к рассмотрению второго случая. Комплексная плоскость z для этого случая изображена на рис. 2с. Так же как и в предыдущем случае нам нужно затухающее на действительной оси решение Ψ_4^- справа от x_2 продолжить на действительную ось в область слева от x_1 . Получим

$$\Psi_4^- = (e^{-\delta - i\omega_2} + g e^{i\omega_2}) e^{i\omega_1} \Psi_1^+ + i \{ (g e^{-i\omega_2} + e^{-\delta + i\omega_2}) + (g e^{i\omega_2} + e^{-\delta - i\omega_2}) e^{2i\omega_1} \} e^{-i\omega_1} \Psi_1^-$$

$$\text{где } \omega_1 = \int_{x_1}^0 \rho(z) dz, \quad \omega_2 = \int_0^{x_4} \rho(z) dz, \quad \delta = \left| 2i \int_0^{i\gamma_m z_2} \rho(z) dz \right|, \quad g = \sqrt{1 + e^{2\delta}}.$$

Приравняв нулю коэффициент при Ψ_1^- , получаем условия для

определения энергетических уровней

$$g \cos(\omega_1 + \omega_2) + e^{-\delta} \cos(\omega_1 - \omega_2) = 0, \quad (6)$$

которое можно переписать в виде

$$\operatorname{ctg} \omega_1 \cdot \operatorname{ctg} \omega_2 = \frac{g - e^{-\delta}}{g + e^{-\delta}}. \quad (7)$$

Для анализа полученных выражений можно так же рассмотреть два предельных случая. Первый предельный случай осуществляется при $\xi \rightarrow \infty$. Тогда $\delta \rightarrow \infty$, $g \rightarrow 1$ и $\cos(\omega_1 + \omega_2) = 0$. Таким образом, с увеличением энергии состояния влияние комплексных точек поворота на эти состояния уменьшается.

Во втором предельном случае $\xi \rightarrow 0$, тогда $\delta \rightarrow 0$, $g \rightarrow \sqrt{2}$ и уравнение (7) совпадает с предельным случаем уравнения (5), что свидетельствует о непрерывном переходе при описании энергетических уровней с $\xi < 0$ и $\xi > 0$.

С методической точки зрения представляет интерес нахождение условия, определяющего уровень энергии в особом случае, $\alpha < 0$ и $\xi = 0$. Комплексная плоскость z для этого случая изображена на рис. 2в. При сшивании решения в данном случае нужно помнить, что точка поворота x_2 - кратная, и коэффициент Стокса при переходе через линию Стокса кратной точки поворота отличается от коэффициента Стокса простой точки поворота. С учетом сказанного, получаем

$$\Psi_4^- = i(e^{-i\omega_2} + \sqrt{2}e^{i\omega_2})e^{i\omega_1} \Psi_1^+ + \{ [e^{i\omega_2} - \sqrt{2}(e^{-i\omega_2} + \sqrt{2}e^{i\omega_2})] e^{-i\omega_1} - (e^{-i\omega_2} + \sqrt{2}e^{i\omega_2}) e^{i\omega_1} \} \Psi_1^-.$$

Приравнивая нулю коэффициент при Ψ_1^- , получим уравнение

$$\operatorname{ctg} \omega_1 \cdot \operatorname{ctg} \omega_2 = \frac{\sqrt{2} - 1}{\sqrt{2} + 1},$$

которое находится в полном согласии с предельными случаями уравнений (5) и (7).

3. В этом разделе мы сравним результаты численных расчетов энергетического спектра ангармонического осциллятора, вычисленного по формулам (5) и (7), с результатами расчета другими методами. Для нашей цели представляют интерес два метода: метод ВКБ и численная диагонализация. В методе ВКБ уровни энергии для $\xi > 0$

определяются из условия

$$\int_{x_1}^{x_4} \sqrt{2(\varepsilon - z^4 - \alpha z^2)} dz = \pi(n + 1/2),$$

а при $\varepsilon < 0$ из условия

$$4 \operatorname{ctg}^2 \left(\int_{x_1}^{x_4} \sqrt{2(\varepsilon - z^4 + \alpha z^2)} dz \right) = \exp \left(-2 \int_{x_2}^{x_3} \sqrt{2(z^4 + \alpha z^2 - \varepsilon)} dz \right).$$

Данную задачу можно решить численно путем диагонализации гамильтониана (I). Для этого волновую функцию $\Psi(x)$ уравнения (I) разложим в ряд по собственным функциям гармонического осциллятора. Увеличивая число членов разложения $\Psi(x)$, можно находить энергетические уровни ангармонического осциллятора с любой степенью точности. В наших расчетах мы использовали матрицу 23×23 . Результаты всех расчетов сведены в таблицу.

Сравнивая результаты расчетов отметим, что наибольшая ошибка получается при нахождении энергетических уровней с энергией $\varepsilon \sim 0$. Результаты расчетов по методу Цваана, учитывающие комплексные точки поворота, лучше согласуются с результатами, полученными с помощью численной диагонализации. Особо отметим, что в методе Цваана благодаря непрерывному переходу при нахождении уровней с $\varepsilon < 0$ и $\varepsilon > 0$, не пропускаются и не появляются лишние энергетические уровни, как в методе ВКБ (см. при $\alpha = -2$ и $\alpha = -4$).

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

ТАБЛИЦА
Энергетический спектр ангармонического осциллятора
в зависимости от α

| L | метод ВКБ | метод Цваана | численная диагонализация |
|-----|--------------|-----------------|-----------------------------|
| 4 | 1.4585 | 1.4585 | 1.4969 |
| | 4.6045 | 4.6045 | 4.6333 |
| | 8.0048 | 8.0048 | 8.0276 |
| 2 | 1.0812 | 1.0846 | 1.1419 |
| | 3.6057 | 3.6057 | 3.6395 |
| | 6.4750 | 6.4750 | 6.5009 |
| 0 | 0.5463 | 0.6280 | 0.6680 |
| | 2.3635 | 2.3575 | 2.3936 |
| | 4.6705 | 4.6708 | 4.6968 |
| | 7.3148 | 7.3148 | 7.3357 |
| -2 | -0.0903 | -0.0655 | -0.1304 |
| | 0.0000 | - | - |
| | 0.7681 | 0.5922 | 2.5438 |
| | 2.5006 | 2.5209 | 4.6654 |
| -4 | -2.1486 | -2.1484 | -2.1992 |
| | 2.0538 | -2.0540 | -2.1034 |
| | - | 0.3403 | 0.3705 |
| | 1.6339 | 1.5254 | 1.5734 |
| | 3.6166 | 3.6321 | 3.6514 |
| -6 | -6.6173 | -6.6174 | -6.6427 |
| | -6.6154 | -6.6154 | -6.6106 |
| | -2.3991 | -2.3990 | -2.4511 |
| | -2.2586 | -2.2589 | -2.3156 |
| | 0.1009 | 0.3747 | 0.4157 |
| | 1.7588 | 1.6195 | 1.6787 |

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Swaan A. Intensitäten im Ca-Funkenspektrum. Thesis, Utrecht. 1929.
2. Kemble E.C. The Fundamental Principles of Quantum Mechanics. Mc.Grow-Hill, 1937.
3. Хединг Дж. Введение в метод фазовых интегралов. М., Мир. 1965.
4. Покровский В.Л., Халатников И.М., ИЭФ, 40, с. 1713, 1961.
5. Пономарев Л.И. Лекции по квазиклассике. Препринт ИТФ-53, 1967.
6. Chan S.I. et al. J. Chem. Phys. 41, 2828, 1964.
7. Bender G.M., Wu T.T. Phys. Rev., 184, 1231, 1969.
8. Graffi S., Grecchi V., G. Turchetti. Nuovo Cimento, 4B, 313, 1971.
9. Misra S.N., Datta K. et al. J. Math. Phys., 14, 1190, 1973.
10. Будник А.П., Гай Е.В., Работнов Н.С. Приближение Паде и задача об ангармоническом осцилляторе в квантовой механике. Препринт ФЭИ-583, Обнинск-1975.
11. Герштейн С.С., Пономарев А.И., Пузынина Т.Н. ИЭФ, 48, с.632, 1965.
12. Гольдман Н.И., Кривченко В.Д. Сборник задач по квантовой механике. М., ГИИТ, § 2, задача № 9. 1957

ФЭИ-772. Т-12578 от 5.08.77 г. Объем 0,5 уч.-изд.л. Тираж III экз.
Индекс 3624. Цена 5 коп. Заказ № 559
Отпечатано на ротационной ФЭИ, сентябрь 1977 г.

Цена 5 коп.

Индекс 3624