Вычисления энергетического спектра для двумерного уравнения Шредингера

И. Н. Беляева [1], Н. А. Чеканов [1], С. И. Виницкий [2],

[1] Белгородский государственный университет, e-mail: chekanov@bsu.edu.ru

[2] Объединенный институт ядерных исследований

В работе развит подход к решению двумерного нелинейного уравнения Шредингера. Представлена общая схема решения, и детально исследован частный вид нелинейного оператора Гамильтона

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}(\frac{\partial^2}{\partial q_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial q_2^2}) + \frac{1}{2}(q_1^2 + q_2^2) + b(q_1^2 q_2 - \frac{1}{3}q_2^3) + c(q_1^2 + q_2^2)^2, \qquad (1)$$

который широко используется в молекулярной и ядерной физике.

Сперва вводим вспомогательную скалярную функцию, которая играет роль классической гамильтоновой функции. Выполняя затем каноническое преобразование к новым канонически сопряженным переменным, приводим вспомогательную гамильтонову функцию к нормальной форме Биркгофа-Густавсона при помощи символьного пакета REDUCE. С помощью правила соответствия Вейля строится ее квантовый аналог как дифференциальный оператор в виде ряда, который дает приближенное выражение для оператора Гамильтона в исходном уравнении Шредингера.

Поскольку классическая вспомогательная функция Гамильтона имеет резонанс 1:1, тогда в нормальной форме Биркгофа-Густавсона переменные не разделяются. Тем не менее двумерная исходная задача на собственные значения сводится к решению более простой одномерной задачи. Задача на собственные значения для полученного одномерного квантового аналога решается численно, и ее решение дает приближенный энергетический спектр начального уравнения Шредингера.

Выполнены расчеты энергетического спектра согласно нашему методу, а также прямым численным методом диагонализации исходного точного гамильтониана (1). Полученные результаты сравниваются с результатами, известными в литературе, и найдено хорошее согласие, по крайней мере, для умеренных значений параметров гамильтониана.

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант No. 00-02-16263 и грант No. 03-02-17695).