

УДК 533.9

## Расчет энергий состояний линейного и сферического ангармонических осцилляторов

*И. А. Муленко, В. И. Обод*

Николаевский государственный университет, г. Николаев, Украина

*Ю. А. Выжол*

Национальный университет кораблестроения, г. Николаев, Украина

*А. Л. Хомкин*

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*Предложен метод решения уравнения Шредингера для линейного и сферического ангармонического осциллятора, не использующий предположения о малости ангармонической части гамильтониана и выходящий за рамки теории возмущений. Решение ищется в виде разложения по системе собственных функций линейного и сферического гармонических осцилляторов, соответственно. Ангармоническая часть потенциала задается в виде полинома по линейной и радиальной координатам. Рассчитаны значения энергии основного и возбужденных состояний ангармонического осциллятора. Метод позволяет рассчитывать значения энергии высоковозбужденных уровней с большой точностью в широком диапазоне изменения параметров ангармоничности.*

К числу простейших модельных квантовых систем, допускающих точное аналитическое решение уравнения Шредингера, относятся линейный и сферический гармонические осцилляторы [1]. Гармонический осциллятор находит широкое применение в современной квантовой физике для моделирования реальных квантово-механических систем [2]. Истинные потенциалы взаимодействия частиц в различных квантовых системах (например, потенциалы взаимодействия атомов в молекулах или в узлах кристаллической решетки) существенно отличаются от потенциала гармонического осциллятора. Кроме того, в большинстве случаев само определение "истинного" потенциала взаимодействия представляет серьезные затруднения. Поэтому для уточнения собственных значений энергии и вида волновых функций реальной квантовой системы вводятся различные поправки на ангармоничность. Затем в рамках теории возмущений приближенно решается задача об энергетическом спектре квантовой системы. Применимость указанного подхода ограничена малостью параметров ангармоничности. Это условие ограничивает число возможных состояний энергетического спектра системы, для которых собственные значения энергии и собственные волновые функции могут

быть вычислены с приемлемой точностью. Как правило, это основное состояние и первые 2—3 возбужденных состояний, лежащих вблизи дна потенциальной ямы, где вид потенциальной функции слабо отличается от потенциала какой-либо модельной системы, допускающей точное решение (например, гармонический осциллятор). Кроме того, как показано в [3], для ангармонического осциллятора с поправкой на ангармоничность вида  $\sim \alpha_4 x^4$  поправки к энергии факториально растут с ростом порядка теории возмущений.

В работе [4] предложен метод решения уравнения Шредингера, близкий к теории возмущений для случая вырожденных энергетических уровней, который не опирается на предположение о малости возмущения. Решению уравнения предшествует выбор некоторой невозмущенной волновой функции искомого состояния и волновых функций всех состояний, которые смешиваются посредством возмущения с данным состоянием. При решении уравнения Шредингера последнее заменяется эквивалентной системой алгебраических уравнений, которая, однако, не может быть решена точно. Для ее приближенного решения используется ряд уравнений теории возмущений. Применимость предложенного метода продемонстрирована на примере задачи

для ангармонического осциллятора с поправкой на ангармоничность вида  $\sim \alpha_4 x^4$ .

Целью настоящей работы является исследование дискретного энергетического спектра модельных квантовых систем, основанное на решении уравнения Шредингера в энергетическом представлении с выходом за рамки теории возмущений. Решение уравнения Шредингера приведено для двух типов простейших модельных квантовых систем: линейного и сферического ангармонического осцилляторов. Ангармоническая часть потенциала взаимодействия представляется в виде многочлена от линейной  $x$  и радиальной  $r$  координаты для линейного и сферического осцилляторов, соответственно, с постоянными коэффициентами при различных степенях переменных  $x$  и  $r$ . Указанные постоянные рассматриваются как параметры ангармоничности. В данной работе параметры ангармоничности не предполагаются малыми. Поэтому решение приводится в энергетическом представлении и ищется в виде рядов по полной системе невозмущенных ортогональных функций сразу для всех энергетических уровней.

#### Линейный ангармонический осциллятор

Рассмотрим задачу для линейного ангармонического осциллятора. Гамильтониан такой системы определяется выражением

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m_0 \omega_0}{2} x^2 + \beta(x). \quad (1)$$

Уравнение Шредингера принимает вид

$$\hat{H} \psi = E \psi, \quad (2)$$

где  $\hbar$  — постоянная Дирака;

$m_0$  — масса электрона;

$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m_0}}$ , где  $k$  — силовая постоянная,

$$\beta(x) = \beta_3 x^3 + \beta_4 x^4 + \dots + \beta_5 x^5. \quad (3)$$

Требуется рассчитать энергетические уровни  $E_n$  и волновые функции  $\psi_n$  состояний данной системы.

Задача решается методом перехода к энергетическому представлению. Для этого предварительно введем безразмерную переменную  $q = \frac{x}{x_0}$ , где

$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0 \omega_0}}$ , тогда (2) с учетом (1), (3) будет иметь

следующий вид:

$$\left[ -\frac{d^2}{dq^2} + q^2 + (\alpha_3 q^3 + \alpha_4 q^4 + \dots + \alpha_5 q^5) \right] \psi = \lambda \psi, \quad (2')$$

где  $\lambda = \frac{2E}{\hbar \omega_0}$ .

Таким образом, требуется решить дифференциальное уравнение вида

$$\left( -\frac{d^2}{dq^2} + U \right) \psi = E \psi \quad (4)$$

с потенциальной энергией  $U(q) = q^2 + (\alpha_3 q^3 + \alpha_4 q^4 + \dots + \alpha_5 q^5)$ .

Заметим, что в дальнейшем при решении задачи не потребуется разделять гамильтониан системы на невозмущенную часть и возмущение.

Используем разложение  $\psi$  по полной системе ортонормированных функций  $\{\varphi_n\}$ :

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n. \quad (5)$$

Подставим его в (4) и получим

$$\hat{H} \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n = E \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n,$$

после скалярного умножения на  $\varphi_m$  получаем

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n \int \varphi_m^* \hat{H} \varphi_n dq = E \sum_{n=0}^{\infty} a_n \int \varphi_m^* \varphi_n dq$$

или

$$\sum_n H_{mn} a_n = E a_m,$$

где  $H_{mn}$  — матричный элемент перехода из состояния  $m$  в состояние  $n$ .

Таким образом, точное решение задачи сводится к решению бесконечной алгебраической однородной системы линейных уравнений. Ее приближенное решение может быть получено путем редукции

$$\sum_{n=0}^k a_n \int \varphi_m^* \hat{H} \varphi_n dq = E \sum_{n=0}^k a_n \int \varphi_m^* \varphi_n dq, \quad m = 0, \dots, k. \quad (6)$$

Редукция вносит определенную ошибку, но при больших  $k$  для низколежащих энергетических уровней с главным квантовым числом  $n \leq k/2$  она не превышает машинную погрешность работы с действительными числами, если при этом параметры ангармоничности  $|\alpha_j| \leq 1$ . Вместе с тем погрешность вычисления значений энергии достаточно быстро возрастает с параметром ангармоничности. Энергетические уровни  $E_n$  находятся как собственные значения матрицы оператора  $\hat{H}$ . Для этого решается характеристическое уравнение системы (6). Численная реализация такого алгоритма связана со значительными трудностями. Для обеспечения точности расчета  $E_n$ , равной  $\varepsilon$ , следует взять  $L = \varepsilon^{-\gamma}$  ( $\gamma = 0, 2 \dots 2$ ) членов. Но тогда для определения средних и высоких энергетических уровней необходимо использовать матрицу больших размерностей  $L$ . А при увеличении  $L$  в  $z$  раз объем памяти следует увеличить в  $z^2$  раз, что делает затруднительным нахождение средних  $n \geq 10$  и высоких  $n \geq 100$  энергетических уровней.

Чтобы преодолеть данную трудность, нужно выбрать специальную систему ортогональных функций

$\{\varphi_n\}$  в разложении (5). Для ангармонического осциллятора в качестве  $\{\varphi_n\}$  возьмем решение уравнения (2')  $\{\varphi_n^0\}$  в случае, когда  $\alpha_i = 0$ ,  $i = 3, 4, \dots$  (гармонический осциллятор)

$$\psi_n^0 = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{q^2}{2}} H_n,$$

где  $H_n$  — полином Эрмита.

Различные функции  $\varphi_n^0$  связаны между собой следующим рекуррентным соотношением:

$$q\psi_n^0 = \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}^0 + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}^0. \quad (7)$$

Матричные элементы переходов определяются выражением

$$H_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^0 [\hat{H}_0 + (\alpha_3 q^3 + \alpha_4 q^4 + \dots + \alpha_s q^s)] \psi_n^0 dq = \\ = \lambda_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^0 \psi_m^0 dq + \sum_{i=3}^s \alpha_i \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^0 (q^i \psi_n^0) dq,$$

где  $\hat{H}_0$  — нормированный гамильтониан гармонического осциллятора.

Используя (7), для матричных элементов получаем соотношение

$$H_{mn} = \lambda_n \delta_{mn} + \sum_{i=3}^s \alpha_i \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^0 \left( \sum_{l=n-s}^{n+s} \rho_l(n) \psi_l^0 \right) dq, \quad (8)$$

где  $\rho_l(l)$  — функция от  $\sqrt{\frac{n}{2}}$ ,  $\sqrt{\frac{n+1}{2}}$ , ... в соответствии с (7).

Легко заметить, что при  $|n - m| > s$ ,  $H_{nm} = 0$ ,  $p$  — число верхних (нижних) ненулевых побочных диагоналей. Таким образом, получаем  $2s + 1$  — диагональную симметричную матрицу, для работы с которой необходимо задействовать  $k(s+1)$  элементов вместо  $k^2$ , как при произвольных  $\{\varphi_n\}$ .

### Сферический ангармонический осциллятор

Задача для сферического осциллятора решается аналогично. В этом случае гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + \frac{m_0 \omega^2 r^2}{2} + \beta(r^2),$$

где  $\beta(r^2)$  — полиномиальная ангармоническая добавка.

Уравнение Шредингера будет

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (9)$$

В силу законов сохранения импульса и момента импульса волновая функция распадается на произведение радиальной и угловой частей

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{R(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (10)$$

где  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  — сферические функции. После подстановки (10) в (9) и замены  $r = z \sqrt{\frac{\hbar}{m_0 \omega}}$  имеем

$$\left(-\frac{d^2}{dz^2} + z^2 + \frac{l(l+1)}{z^2} + \alpha(z^2)\right)R(z) = E'R(z), \quad (11)$$

где  $E' = \frac{2E}{3\hbar\omega}$  — энергия, нормированная на основное состояние сферического гармонического осциллятора [5].

За ортогональную систему функций принимаем решение (11)  $\{R_{nl}^0\}$  при  $\alpha(z^2) = 0$

$$R_{nl}^0(z) = A_{nl} e^{-\frac{1}{2}z^2} z^{l+1} L_n^{l+\frac{1}{2}}(z^2); \\ A_{nl} = \frac{2\sqrt{(2(n+l)+1)!}}{(2l+1)! \sqrt{n!} (\sqrt{\pi}) 2^{n-l}}. \quad (12)$$

Для функций  $L_n^l$  существует рекуррентное соотношение [6], аналогичное (7)

$$xL_n^l(x) = (l+2n+1)L_n^l(x) - L_{n+1}^l - n(l+n)L_{n-1}^l, \quad (13)$$

поэтому аналогично нахождению  $H_{nm}$  найдем матричные элементы радиальной части волновой функции  $R_{nm}^l$  в виде

$$R_{nm}^l = \lambda_n^l \delta_{nm} + \sum_{j=3}^s \alpha_j \int_0^{\infty} R_{nm}^{0,l} \left( \sum_{i=n-s}^{n+s} \rho_i(n,l) R_{ni}^{0,j} \right),$$

где  $s$  — максимальная степень в полиномиальной добавке  $\alpha(z^2)$ ;

$\rho_i(n, l)$  — рациональные функции квантовых чисел  $n, l$ , вид которых также может быть определен с помощью (13).

Таким образом, при  $|n - m| > s$  —  $R_{nm}^l = 0$ , и матрица уравнения (9) — полосатая.

### Алгоритмы расчетов

При решении задачи были использованы два метода поиска собственных значений гамильтониана в матричном виде.

### Частичная проблема собственных значений

Последовательность решения такова:

1. Формирование ленточной матрицы с использованием рекуррентных соотношений (7) или (13). В программе матрица

$$H = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & \dots & h_{1k} & 0 & 0 & \dots \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & \dots & h_{2k} & h_{2,k+1} & 0 & \dots \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} & \dots & h_{3k} & h_{3,k+1} & h_{3,k+2} & \dots \end{pmatrix}$$

сохраняется и используется в виде

$$H' = \begin{pmatrix} h_{11} & 0 & 0 & 0 \\ h_{22} & h_{12} & 0 & 0 \\ h_{33} & h_{23} & h_{13} & 0 \\ h_{33} & h_{34} & h_{24} & h_{14} \\ h_{33} & h_{45} & h_{35} & h_{25} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Для формирования  $\{H\}$  используются формулы (7), (8), (12), (13).

2. Приведение матрицы  $\{H\}$  к трехдиагональному виду осуществляется с использованием модифицированного для ленточных матриц метода отражений Хаусхолдера [7], который переводит матрицу  $\{H\}$  к виду матрицы Хессенберга

$$H = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \dots \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & \dots & 0 & 0 & 0 \dots \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} & \dots & h_{3k} & h_{3,k+1} & 0 \dots \end{pmatrix}$$

и тридиагонализирует симметричную матрицу. Во время приведения матрицы динамически формируется дополнительная матрица  $H1$  для хранения промежуточных величин.

3. Определение собственных чисел трехдиагональной симметричной матрицы с помощью QL-алгоритма [7] с неявными сдвигами для трехдиагональных матриц; динамическая коррекция числа итераций.

### Полная проблема собственных значений

Для нахождения пар собственное значение — собственный вектор был использован алгоритм обратных итераций с переменными сдвигами [7]. Этот алгоритм можно определить совокупностью следующих равенств:

$$\begin{aligned} (A - \lambda_j^{(k-1)} \varepsilon) y^{(k)} &= x^{(k-1)}, \\ x^{(k)} &= y^{(k)} / \|y^{(k)}\|, \quad \lambda_j^{(k)} = \lambda_j^{(k-1)} + \left\langle \frac{x_j^{(k-1)}}{y_j^{(k)}} \right\rangle, \end{aligned}$$

где  $k = 1, 2, \dots$  — номер итерации;

$\varepsilon$  — единичная матрица;

$\langle \rangle$  — операция усреднения по всем  $i$ ;

число  $\lambda_j^{(0)} \approx \lambda_j$  и нормированный вектор  $x^{(0)}$  задаются.

Особенность алгоритма заключается в следующем: чем точнее мы знаем собственную пару, тем быстрее он сходится. Скорость сходимости такого процесса — квадратичная. Зачастую бывает достаточно сделать 2—3 итерации, чтобы получить заданную собственную пару с реально возможной точностью.

### Обсуждение результатов

Построенная методика решения уравнения Шредингера была использована для решения задачи на собственные значения в моделях линейного и сферического ангармонических осцилляторов. Разработанная программа позволяет задать табуляцию зависимостей энергий основного и возбужденных состояний ангармонического осциллятора от одного или двух параметров ангармоничности при фиксированных значениях остальных параметров.

Ангармонический осциллятор, в особенности линейный, представляет собой квантовую систему, на примере которой наиболее удобно осуществлять тестирование различных новых методов решения квантовомеханических задач. Поэтому эта система является достаточно подробно исследованной. В работе [8] был получен спектр собственных значений линейного ангармонического осциллятора путем численного решения уравнения Шредингера для модели с поправкой на ангармоничность вида  $\alpha_4 q^4$ . При численном интегрировании не предполагалось малым значение параметра ангармоничности  $\alpha_4$ . Для низколежащих энергетических уровней точность расчета составляет порядка  $10^{-6}$  при значениях параметра ангармоничности  $\sim 10$ . Вместе с тем с ростом главного квантового числа и параметра ангармоничности численное интегрирование уравнения Шредингера становится проблематичным. Как уже упоминалось, в работе [4] предложен метод решения уравнения Шредингера для ангармонического осциллятора, близкий к теории возмущений для случая вырожденных энергетических уровней. Здесь также не предполагается малость значения параметра ангармоничности. Однако точность расчета энергии уровней в [4] не может считаться удовлетворительной даже для низколежащих уровней при больших значениях параметра  $\alpha_4$ .

В настоящей работе для исключения из уравнений множителей  $\sim 1$  энергия нормирована на

величину энергии основного состояния гармонического осциллятора  $\hbar\omega_0/2$ . Поэтому все приводящиеся ниже графические зависимости основаны на этой нормировке энергии. В работах [4, 8] нормировка энергии выполнена на величину  $\hbar\omega_0$ . Поэтому для сравнения с результатами расчетов [4, 8] был осуществлен переход

от нормировки на  $\hbar\omega_0/2$  к нормировке на  $\hbar\omega_0$ . При этом значение безразмерной энергии уровня уменьшается в 2 раза. Вместе с тем значениям параметров ангармоничности в данной модели соответствуют в 2 раза меньшие значения тех же параметров в работах [4, 8]. В сравнительной табл. 1 результаты приведены в нормировке [4, 8]. Результаты расчета, полученные в данной работе (последняя колонка табл. 1), вычислены с точностью не ниже  $10^{-12}$ . Выбирая матрицу гамильтониана достаточно большого размера, можно получить с высокой точностью значение энергии уровня с большим  $n$ , в том числе при больших значениях  $\alpha_4$ . В табл. 1 порядок матрицы  $k = 1000$ , поэтому значения энергии всех нижних уровней заведомо вычислены с указанной точностью. Программа расчета энергетических уровней реализована на

языке Delphi 7.0. Численные расчеты выполнены на компьютере Pentium 4 с тактовой частотой 2,6 ГГц. Время вычисления всего массива уровней до 100 при  $k = 1000$  и заданном значении параметра ангармоничности составляет порядка 10 с.

Табл. 2 иллюстрирует процесс сходимости метода в зависимости от номера энергетического уровня и параметра ангармоничности. Для уровней с  $n = 0, 4, 10$  приведены по три колонки с малым  $\sim 0,1$ , средним  $\sim 1$  и большим  $\sim 10$  значением параметров ангармоничности. Как видно из табл. 2, сходимость разложения волновой функции ухудшается с ростом номера энергетического уровня и параметра ангармоничности. По крайней мере при  $k = 1000$  метод позволяет рассчитать уровни энергии вплоть до  $n = 50$  и  $\alpha_4/2 = 10$  с погрешностью не более  $10^{-12}$ .

Номер уровня $n$	Параметр ангармоничности $\alpha_4/2$	Методы расчета		
		по работе [8]	по работе [4]	по данной работе
0	0,1	0,559146	0,559163	0,5591463773
	0,5	0,696176	0,697209	0,6961758208
	1	0,803771	0,802928	0,8037706512
	10	1,50497	1,53492	1,5049724078
2	0,1	3,13862	3,13402	3,1386243085
	0,5	4,32752	4,35647	4,3275249789
	1	5,17929	5,58723	5,1792916876
	10	10,3471	27,5621	10,3470555925
4	0,1	6,22030	6,42299	6,2203009000
	0,5	9,02878	13,6214	9,0287787182
	1	10,9636	22,8727	10,9635830941
	10			22,4087512887

Окончание табл. 1

Номер уровня $n$	Параметр ангармоничности $\alpha_4/2$	Методы расчета		
		по работе [8]	по работе [4]	по данной работе
10	0,1			17,3519076357
	0,5			26,7245510698
	1			32,9332630402
	10			68,8036951829
30	0,1			66,4104414292
	0,5			107,3898417746
	1			133,7832602708
	10			283,8281806399

Таблица 2

Порядок матрицы $k$	$n = 0$			$n = 4$			$n = 10$		
	$\alpha_4/2=0,1$	$\alpha_4/2=1$	$\alpha_4/2=10$	$\alpha_4/2=0,1$	$\alpha_4/2=1$	$\alpha_4/2=10$	$\alpha_4/2=0,1$	$\alpha_4/2=1$	$\alpha_4/2=10$
10	0,559147	0,805618	1,595153	6,242787	16,889218	—	—	—	—
20	0,559146	0,803774	1,510566	6,220303	11,003931	38,655019	17,802607	77,089244	682,576190
40	0,559146	0,803771	1,504991	6,220301	10,963592	22,646320	17,351909	33,775489	175,740921
100	0,559146	0,803771	1,504972	6,220301	10,963583	22,408762	17,351908	32,933263	68,903245
200	0,559146	0,803771	1,504972	6,220301	10,963583	22,408751	17,351908	32,933263	68,803695
400	0,559146	0,803771	1,504972	6,220301	10,963583	22,408751	17,351908	32,933263	68,803695
800	0,559146	0,803771	1,504972	6,220301	10,963583	22,408751	17,351908	32,933263	68,803695
1000	0,559146	0,803771	1,504972	6,220301	10,963583	22,408751	17,351908	32,933263	68,803695

На рис. 1—3 в качестве примера приведены диаграммы зависимостей значений энергии уровней ли-

нейного ангармонического осциллятора от некоторых параметров ангармоничности.

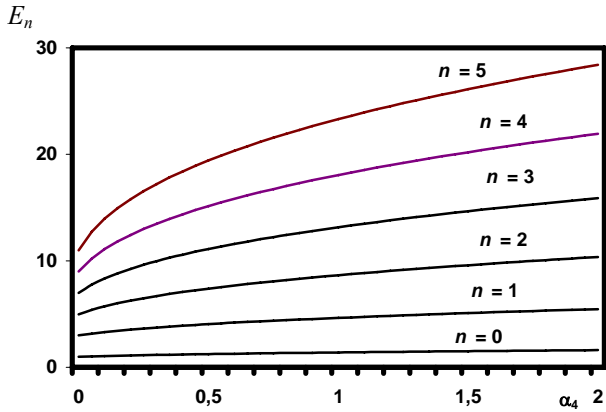


Рис. 1. Зависимость энергии основного и первых возбужденных состояний ангармонического осциллятора от параметра ангармоничности  $\alpha_4$  для ангармонической поправки  $\Delta U = \alpha_4 q^4$

Рис. 2. Поверхность энергетического уровня  $n = 3$  для ангармонической поправки  $\Delta U = \alpha_3 q^3 + \alpha_4 q^4$  как функция параметров ангармоничности  $\alpha_3$  и  $\alpha_4$

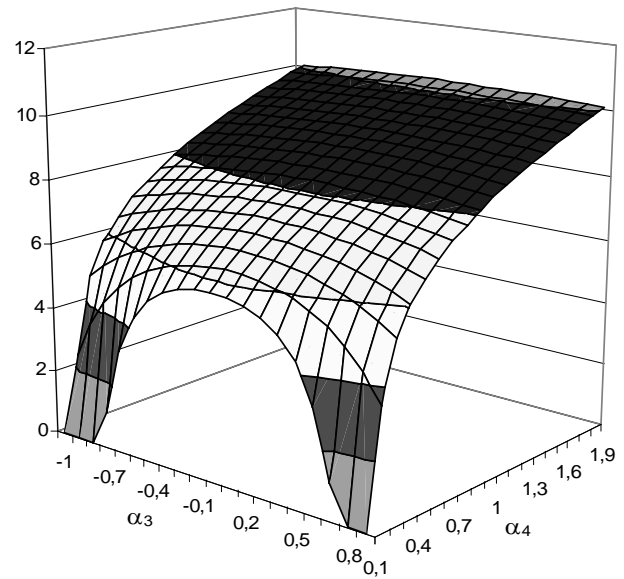
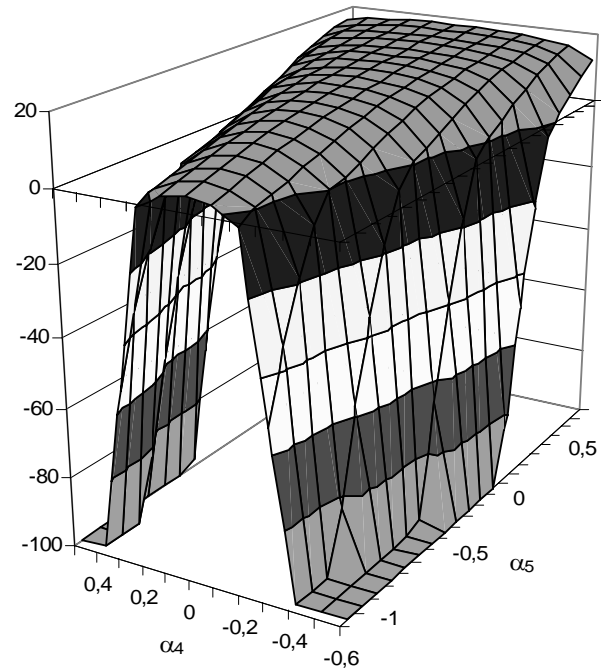


Рис. 3. Зависимость энергии уровня  $n = 4$  от параметров ангармоничности  $\alpha_4$  и  $\alpha_5$  при фиксированном значении  $\alpha_6 = 0,15$  для ангармонической поправки  $\Delta U = \alpha_4 q^4 + \alpha_5 q^5 + \alpha_6 q^6$



На рис. 1 изображены зависимости энергии  $E_n$  основного и нескольких возбужденных состояний ангармонического осциллятора с  $0 \leq n \leq 5$  от параметра ангар-

моничности  $\alpha_4$  для поправки к модельному потенциалу  $\Delta U = \alpha_4 q^4$ .

На рис. 2 представлена поверхность энергетического уровня  $n = 3$  для поправки к модельному потенциалу

$\Delta U = \alpha_3 q^3 + \alpha_4 q^4$  от параметров ангармоничности  $\alpha_3$  и  $\alpha_4$  в широкой области изменения их значений. Для потенциала данного вида характерно появление двух потенциальных ям разной глубины при  $\alpha_3 \neq 0$ . При этом в каждой потенциальной яме существует собственная система низколежащих энергетических уровней. На рис. 2 приведена зависимость энергии уровня  $n = 3$ , который является общим для обеих потенциальных ям и лежит выше центрального потенциального барьера.

Развитый метод позволяет рассчитывать энергетические уровни ангармонического осциллятора с ангармонической добавкой любого полиномиального вида (3). Для примера на рис. 3 изображена зависимость энергии возбужденного состояния с  $n = 4$  от параметров ангармоничности  $\alpha_4$  и  $\alpha_5$  при фиксированном значении  $\alpha_6$ . Физическая интерпретация выходит за рамки данной работы, но, по-видимому, потенциалом такого вида можно моделировать взаимодействие атомов (ионов) в кристаллической решетке в некотором диапазоне изменения термодинамических параметров.

### Заключение

В настоящей работе развивается метод решения уравнения Шредингера для линейного и сферического ангармонического осциллятора. Задача решена в энергетическом представлении с выходом за рамки теории возмущений. Используется полиномиальный вид ангармонической части потенциала взаимодействия, которая не предполагается малой по сравнению с гармонической частью гамильтониана системы. Решение задач ищется в виде разложения по системе собственных функций линейного и сферического гармонических осцилляторов, соответственно.

При нахождении собственных значений гамильтониана использовано приведение матрицы гамильтониана к трехдиагональному виду с применением метода отражений Хаусхолдера. Кроме того, для решения этой

задачи был использован алгоритм обратных итераций с переменными сдвигами. Данные алгоритмы позволяют существенно снизить объем вычислений и ускорить сходимость итерационного процесса.

Показано, что сходимость разложения волновой функции ухудшается с ростом номера энергетического уровня и параметра ангармоничности. Предложенный метод позволяет рассчитать уровни энергии вплоть до  $n = 50$  и  $\alpha_4/2 = 10$  с погрешностью не более  $10^{-12}$  при количестве членов разложения не более  $k = 1000$ .

Исследованы зависимости значений энергии различных уровней от вида ангармонической части гамильтониана.

С помощью предложенного метода можно моделировать колебательные энергетические уровни атомов в молекулах, а также фононный спектр кристаллической решетки в твердых телах. Данный метод может быть обобщен на случай более сложных квантовых систем со сферически симметричным потенциалом, в частности, для расчета энергетических уровней атома во внешнем поле.

### Л и т е р а т у р а

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1989. — 768 с.
2. Мошинский М. Гармонический осциллятор в современной физике. — М.: Наука, 1972. — 152 с.
3. Bender C. M., Wu T. T. // Phys. Rev. Lett. 1976. № 37. P. 117.
4. Сабиров Р. Х. Новый подход к решению уравнения Шредингера. Ангармонический осциллятор// ЖЭТФ. 1996. Т. 109. № 5. С. 1519—1523.
5. Давыдов А. С. Квантовая механика. — М.: ГИФ-МЛ, 1963. — 748 с.
6. Кузнецов Д. С. Специальные функции. — М.: Высшая школа, 1969. — 424 с.
7. Вержбицкий В. М. Численные методы. — М.: Высшая школа, 2000. — 274 с.
8. Bender C. M., Wu T. T. // Phys. Rev. 1969. № 184. P. 1231.

Статья поступила в редакцию 18 июля 2006 г.

## The calculation of energy levels on linear and spherical unharmonic oscillator

I. A. Mulyenko, V. I. Obod  
Nikolaev State University, Nikolaev, Ukraine

Yu. A. Vyzhol  
National University of Shipbuilding, Nikolaev, Ukraine

A. L. Khomkin  
Integrated Institute for High Temperatures, Moscow, Russia

*The method of the decision of the Shredinger equation for linear and spherical unharmonic oscillator not using the assumptions about small unharmonic Hamiltonian part and leaving for a framework of the perturbation theory has been proposed. The decision is searched as decomposition on system of own functions linear and spherical harmonic oscillators accordingly. The unharmonic part of potential is set as polynom on linear and radial coordinates. The energy of basic and*

---

*excited levels condition unharmonious oscillator are calculated. The method allows calculating the energy high excited levels with the large accuracy in a wide range of change of unharmonious parameters.*