Благодарности. Автор благодарен проф. Шульге Н.Ф. за обсуждение полученных результатов.

Библиографический список

1. Гайтлер В. Квантовая теория излучения. Изд.3. –М.: ИИЛ, 1956.– 491с.
2. Хомяков Г.К. Неканоническая формулировка квантовой механики на базе расширения шредингеровского описания движения: Научные ведомости БелГУ №1(10)2000, Сер. физика.– 2000.– С.130-133.
3. Хомяков Г.К. Неканоническая формулировка квантовой механики (релятивистская частица с нулевым спином): Научные ведомости БелГУ №1(10)2000, Сер. физика.– 2000.– С.140-141.
4. Гольдстейн Г. Классическая механика. Изд. 2.– М.: Наука, 1975. –-415с.
5. Бом Д. Квантовая теория.М. ГИФМЛ. 1961. -728с.
6. Тирринг В. Принципы квантовой электродинамики.– М.: Высшая школа, 1964.
7. Зоммерфельд А. Строение атома и спектры. М.: ГТТЛ, 1956. – Т.1. -592с.

УДК 517 ББК 22.161 К 18

МЕТОД ПРИБЛИЖЕННОГО РЕШЕНИЕ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Н.В. Камышанченко, Н.А. Чеканов, К. Эльхажжаб
Белгород, Белгородский государственный университет

В работе изложен метод приближенного решения одномерного уравнения Шредингера

$$\hat{H}\psi(q) = E\psi(q) \tag{1}$$

на основе метода нормальных форм [1-8]. Для иллюстрации и сравнения наших результатов с известыми из литературы выбран частный вид гамильтониана

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dq^2} + \frac{q^2}{2} + \alpha q^4, \tag{2}$$

где α – параметр.

Для решения дифференциального уравнения (1), (2) вводим вспомогательную функцию, которая рассматривается как классический гамильтониан

$$\begin{gathered} H(q,p) = H^{(2)} + H^{(4)}, \\ H^{(2)} = \frac{1}{2}\left(p^2 + q^2\right), \\ H^{(4)} = \alpha q^4, \end{gathered} \tag{3}$$

где p и q канонически сопряженные импульс и координата, зависящие от времени.

Выполняя канонические преобразования $(q,p) \to (\xi,\eta)$ с производящей функ-

$$F(q,\eta) = q\eta + W(q,\eta), \tag{4}$$

приводим классическую гамильтоновую функцию (3) к нормальной форме $H(q,p) \to \Gamma(\xi,\eta)$ в виде суммы однородных полиномов по переменным (ξ,η). Как известно [9,10], гамильтонова функция $\Gamma(\xi,\eta)$имеет нормальную форму, если выполняется условие

$$D(\xi,\eta)\Gamma(\xi,\eta) = 0, \tag{5}$$

где

$$D(\xi,\eta) = \eta\frac{\partial}{\partial\xi} - \xi\frac{\partial}{\partial\eta}. \tag{6}$$

Производящая функция (4) удовлетворяет уравнениям [10]

$$\begin{gathered} p = \eta + \frac{\partial W(q,\eta)}{\partial q}, \\ \xi = q + \frac{\partial W(q,\eta)}{\partial \eta}, \end{gathered} \tag{7}$$

которые связывают старые (q,p) и новые переменные (ξ,η).

Гамильтоновая функция H(q,p), ее нормальная форма $\Gamma(\xi,\eta)$ и функция $W(q,\eta)$ представляются следующими суммами

$$\begin{gathered} H(q,p) = \sum_{s\ge2} H^{(s)}(q,p), \\ H^{(s)}(q,p) = \sum_{l+m=s} h_{lm} q^l p^m, \\ \Gamma(\xi,\eta) = \sum_{s\ge2}\Gamma^{(s)}(\xi,\eta), \end{gathered} \tag{8}$$

$$\Gamma^{(s)}(\xi,\eta)=\sum_{l+m=s}\gamma_{lm}\xi^l\eta^m, \qquad (9)$$

$$W^{(s)}(q,\eta)=\sum_{l+m=s}w_{lm}q^l\eta^m,$$

$$W(q,\eta)=\sum_{s\geq 2}W^{(s)}(q,\eta). \qquad (10)$$

Здесь величины h_{lm} являются известными (см. уравнение (3)), однако γ_{lm} и w_{lm} – неизвестны.

Согласно работе [10] для нахождения s порядка нормальной формы $\Gamma^{(s)}$ и соответствующего производящего полинома $W^{(s)}$, т. е. коэффициентов γ_{lm} и w_{lm}, надо решить следующее основное дифференциальное уравнение

$$DW^{(s)}(q,\eta)=-H^{(s)}(q,\eta)+\Gamma^{(s)}(q,\eta),$$
$$s=2,3,\ldots \qquad (11)$$

При помощи символьной REDUCE программы [11] получена до порядка $s_{max}=12$ классическая нормальная форма

$$\Gamma_{12}=\sum_k\Gamma^{(2k)}, \qquad (k=1,\ldots,6),$$

$$\Gamma^{(2)}=\frac{1}{2}\left(\xi^2+\eta^2\right),$$

$$\Gamma^{(4)}=\frac{3}{8}\alpha\left(\xi^2+\eta^2\right)^2,$$

$$\Gamma^{(6)}=-\frac{17}{32}\alpha^2\left(\xi^2+\eta^2\right)^3, \qquad (12)$$

$$\Gamma^{(8)}=\frac{375}{256}\alpha^3\left(\xi^2+\eta^2\right)^4,$$

$$\Gamma^{(10)}=-\frac{10689}{2048}\alpha^4\left(\xi^2+\eta^2\right)^5,$$

$$\Gamma^{(12)}=\frac{87549}{4096}\alpha^5\left(\xi^2+\eta^2\right)^6.$$

Введем новые комплексные канонически сопряженные переменные

$$z=\frac{1}{\sqrt{2}}(\eta+i\xi), \quad z^*=\frac{1}{\sqrt{2}}(\eta-i\xi), \qquad (13)$$

и представим классическую нормальную форму в следующем виде

$$\Gamma_{12}=zz^*+\frac{3}{8}\alpha z^2z^{*2}-\frac{17}{32}\alpha^2z^3z^{*3}+$$
$$+\frac{375}{256}\alpha^3z^4z^{*4}-\frac{10689}{2048}\alpha^4z^5z^{*5}+ \qquad (14)$$
$$+\frac{87549}{4096}\alpha^5z^6z^{*6}.$$

Чтобы получить квантовый аналог для нормальной формы (14), используем правило сопоставления Вейля [12], которое каждому моному $z^m z^{*n}$ сопоставляет определенный диффренциальное выражение

$$z^{*n}z^m\equiv z^m z^{*n}\rightarrow$$
$$\frac{1}{2^m}\sum_{l=0}^{m}\frac{m!}{l!(m-l)!}\hat{a}^{+l}\hat{a}^n\hat{a}^{+(m-l)}, \qquad (15)$$

где операторы $\hat{a}$, $\hat{a}^+$ определены как

$$\hat{a}^+=\frac{1}{i\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi}-\xi\right), \qquad \hat{a}=\frac{1}{i\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right),$$
$$\hat{a}\hat{a}^+-\hat{a}^+\hat{a}=1. \qquad (16)$$

В результате классической нормальной форме (14) будет сопоставлен дифференциальный оператор

$$\hat{\Gamma}_{12}=\sum_k\hat{\Gamma}^{(2k)}, \qquad (k=1,\ldots,6),$$

$$\hat{\Gamma}^{(2)}=\hat{N}+\frac{1}{2}, \qquad \hat{\Gamma}^{(4)}=\frac{3}{2}\alpha\left(\hat{N}^2+\hat{N}+\frac{1}{2}\right),$$

$$\hat{\Gamma}^{(6)}=-\frac{17}{32}\alpha^2\left(\hat{N}^3+\frac{3}{2}\hat{N}^2+2\hat{N}+\frac{3}{4}\right),$$

$$\hat{\Gamma}^{(8)}=\frac{375}{16}\alpha^3\left(\hat{N}^4+2\hat{N}^3+5\hat{N}^2+4\hat{N}+\frac{3}{2}\right),$$

$$\hat{\Gamma}^{(10)}=-\frac{10689}{64}\alpha^4\times$$
$$\times\left(\hat{N}^5+\frac{5}{2}\hat{N}^4+10\hat{N}^3+\frac{25}{2}\hat{N}^2+\frac{23}{2}\hat{N}+\frac{15}{4}\right), \qquad (17)$$

$$\hat{\Gamma}^{(12)}=\frac{87549}{64}\alpha^5\times$$
$$\times\left(\hat{N}^6+\hat{N}^5+\frac{35}{2}\hat{N}^4+30\hat{N}^3+49\hat{N}^2+\frac{69}{2}\hat{N}+\frac{45}{4}\right),$$

где $\hat{N}$ есть дифференциальный оператор вида

$$\hat{N}=\hat{a}\hat{a}^+=\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{d\xi^2}-\xi^2+1\right). \qquad (18)$$

Дифференциальный оператор (17) перепишем следующим образом

$$\hat{\Gamma}_{12}=\sum_k A_{2k}\left(\frac{d^2}{d\xi^2}-\xi^2+1\right)^k,(k=0,...,6)$$

$$A_0=\frac{1}{2}+\frac{3}{4}\alpha-\frac{51}{16}\alpha^2+\frac{1125}{32}\alpha^3-$$
$$-\frac{160335}{256}\alpha^4+\frac{3939705}{256}\alpha^5,$$

$$A_2=1+\frac{3}{2}\alpha-\frac{17}{2}\alpha^2+$$
$$+\frac{375}{4}\alpha^3-\frac{245847}{128}\alpha^4+$$
$$+\frac{6040881}{256}\alpha^5,$$

$$A_4=\frac{3}{2}\alpha-\frac{51}{8}\alpha^2+\frac{1875}{16}\alpha^3-$$
$$-\frac{267225}{128}\alpha^4+\frac{4289901}{64}\alpha^5,$$

$$A_6=-\frac{17}{4}\alpha^2+\frac{375}{8}\alpha^3-\frac{53445}{32}\alpha^4+$$
$$+\frac{1313235}{32}\alpha^5, \qquad (19)$$

$$A_8=\frac{375}{16}\alpha^3-\frac{53445}{128}\alpha^4+\frac{3064215}{128}\alpha^5,$$
$$A_{10}=-\frac{10689}{64}\alpha^4+\frac{262647}{64}\alpha^5,\ A_{12}=\frac{87549}{64}\alpha^5.$$

Дифференциальный оператор в виде суммы (19), в общем бесконечной, представляет начальный гамильтониан (2) уравнения Шредингера.

Тогда задача на собственные значения

$$\hat{\Gamma}_{12}\Phi(\xi)=\lambda\Phi(\xi), \qquad (20)$$

где величины λ и $\Phi(\xi)$ являются собственными значениями и фукциями, представляют собою приближенное решение уравнения Шредингера (1) с гамильтонианом (2). А задача (20) на собственные значения легко решается. Действительно, полиномы Чебышева-Эрмита есть собственные функции дифференциального оператора (20) и любой его степени, а значит, и всего дифференциального выражения (19). Таким образом, собственные значения λ уравнения (20) приближенно определяют энергетический спектр исходного уравнения Шредингера (1), который можно представить следующей формулой

$$E=E^{(2)}+E^{(4)}+E^{(6)}+E^{(8)}+$$
$$+E^{(10)}+E^{(12)},$$

где

$$E^{(2)}=n+\frac{1}{2},$$
$$E^{(4)}=\frac{3}{2}\alpha\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right),$$

$$E^{(6)}=-\frac{17}{4}\alpha^2\left(n^3+\frac{3}{2}n^2+2n+\frac{3}{4}\right),$$
$$E^{(8)}=\frac{375}{16}\alpha^3\left(n^4+2n^3+5n^2+4n+\frac{3}{2}\right).$$

$$E^{(10)}=-\frac{10689}{64}\alpha^4\times$$
$$\times\left(n^5+\frac{5}{2}n^4+10n^3+\frac{25}{2}n^2+\frac{23}{2}n+\frac{15}{4}\right), \qquad (21)$$

$$E^{(12)}=\frac{87549}{64}\alpha^5\times$$
$$\times\left(n^6+3n^5+\frac{35}{2}n^4+30n^3+49n^2+\frac{69}{2}n+\frac{45}{4}\right),$$
$$n=0,1,2,...$$

В табл. приведены наши результаты первых уровней энергии E_{12} уравнения Шредингера (1-2), вычисленные по формуле (21) и значения E_{exact} и E_{QNF}, которые получены в работе [13]. Точные значения энергии E_{exact} вычислены диагонализацией гамильтониана (2) в осцилляторном базисе, а E_{QNF} получены методом квантовой нормальной формы. Как видно из табл. значения энергии, вычисленные по приближенной формуле (21), хорошо согласуются с результатами, полученными в работе [13].

Таблица

Сравнение уровней энергии уравнения Шредингера (1-2)

N	E_{exact}	E_{exact}	E_{12}
0	0.50726	0.50724	0.507212
1	1.5356	1.53546	1.535536
2	2.5908	2.5898	2.590721
3	3.6711	3.6678	3.671087
4	4.7749	4.7669	4.775385
5	5.9010	5.8845	5.902891
6	7.0483	7.0181	7.053602
7			8.228526
8			9.430072
9			10.662540
10			11.932711

Здесь E_{exact} и E_{QNF} вычислены методами диагонализации и квантовой нормальной формы, соответственно [13], а E_{12} – по формуле (21) $(\alpha = 0{,}01)$.

Кроме того, если параметр $\alpha = 5 \cdot 10^{-5}$ в выражении (2), то формула (21) дает для основного состояния (n=0) значение энергии E(n=0)=0.5 x 1.000 074 984, в то время как точное значение [14] этой величины равно E(n=0)=0.5 x 1.000 074 986. При $\alpha = 5 \cdot 10^{-5}$ по нашей формуле (21) получаем E(n=1000) = 0.5 x 2134.5, а точное значение [14] равно E(n=1000)=0.5 x 2134.2.

Однако отметим, что предлагаемое приближение ограничено достаточно малой нелинейной частью в гамильтониане (2) и является одним из вариантов стандартной теории возмущений. Несмотря на частный выбор гамильтониана (2), предлагаемый способ решения уравнения Шредингера можно применить к более широкому классу гамильтонианов.

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 00-02-16337).

Библиографический список

1. Swimm R.T. and Delos.J.B. J. Chem. Phys., 1979, 71, 1706.

2. Jaffe Ch. and Reinhardt W.P. J. Chem. Phys., 1982, 77, 5191.

3. Shirts R.B. and Reinhardt W.P. J. Chem. Phys 1982, 77, 5204.

4. Robnik M. J. Phys.: Math. Gen., 1984, A17, 109.

5. Uzer T., Marcus R.A. J. Chem. Phys., 1984, 81, 5013.

6. N. A. Chekanov N.A. Jad. Fiz., 1989, 50, 344.

7. Farrelly D., Uzer T., Raines P.E., Skelton J.P., Milligan J.A. Phys. Rev., 1992, A45, 4738.

8. Chekanov N.A., Gusev A.A., Krasilnikov V.V. Ghum. Fiz. Khim., 2000, 74, 101.

9. Birkhoff G.D. Dynamical Systems. New York, A.M.S. Colloquium Publication, 1927.

10. Gustavson F.G. The Astronomical Journal, 1966, 71, 670.

11. Basios V., Chekanov N.A., Markovski B.L., Rostovtsev V.A., and Vinitsky S.I.. Comp. Phys. Commun., 1995, 90, 355.

12. Weyl H. The theory of groups and quantum mechanics. Dover Publications, 1931.

13. Ali M.K. J. Math. Phys., v. 26, No. 10, 1985, p. 2565.

14. Banerjee K., Bhatnagar S.P., Choudhry V. and Kanwal S.S. Proc. R. Soc. Lond., 1978, A 360, 575.

УДК 530.1

ГАМИЛЬТОНОВА ДИНАМИКА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД СО СПОНТАННО НАРУШЕННОЙ СИММЕТРИЕЙ

М.Ю. Ковалевский, С.В. Пелетминский
г. Харьков, Харьковский физико-технический институт

В докладе изложены основные идеи и методы гамильтонова подхода описания неравновесной динамики в конденсированных средах. Охвачены классические и квантовые среды, начиная с простых жидкостей и заканчивая такими сложными объектами, как квантовая жидкость ^3He или жидкие кристаллы, которые характеризуются тензорным параметром порядка. Гамильтонов подход позволяет построить не-