НАУЧНЫЕ ВЕДОМОСТИ. 2004. № 3. Вып. 9.

УДК 51-72:530.145

ОБ ОДНОМ СПОСОБЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ДЛЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО ОПЕРАТОРА II ПОРЯДКА

И.Н. Беляева [1], С.И. Виницкий [2], В.А. Ростовцев [3], Н.А. Чеканов [1]*,

[1] Белгородский государственный университет
308007, г. Белгород, ул Студенческая 14
e-mail: chekanov@bsu edu.ru

[2] Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова
141980, ОИЯИ, г. Дубна, Московская обл.
e-mail: vinitsky@thsun1.jinr.ru

[3] Лаборатория информационных технологий
141980, ОИЯИ, г. Дубна, Московская обл.

На основе метода нормальных форм предложен способ вычисления собственных значений и функций дифференциального оператора, каким является оператор Гамильтона в уравнении Шредингера. Изложена общая схема решения и подробно исследован оператор Гамильтона для одномерного ангармонического осциллятора $H_\mu(q) = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dq^2} + \frac{q^2}{2} + \alpha q^\mu$, $\mu = 4,6,8$.

Для этих частных видов нелинейности в потенциальной функции проведены аналитические вычисления с использованием системы REDUCE и получены формулы для энергетических спектров. По полученным формулам выполнены численные расчеты энергетических спектров, сделано сравнение с имеющимися в литературе результатами других авторов и найдено хорошее согласие, по крайней мере, для нижайших уровней.

ВВЕДЕНИЕ.

Со времени пионерских исследований Свимма и Делоса [1] имеется много работ, которые посвящены проблеме квантования [2-9] классических гамильтоновых систем на основе метода нормальных форм Биркгофа-Густавсона [10, 11].

Однако метод нормальных форм может быть применен для решения задачи на собственные значения для дифференциального оператора, такого как в уравнении Шредингера. Основная идея состоит в том, чтобы преобразовать заданный дифференциальный оператор Гамильтона в ряд, в общем бесконечный, в котором каждый его член представляет простое дифференциальное выражение. Для иллюстрации такого приближения выбран частный вид одномерного гамильтониана с четвертой, шестой и восьмой степенью нелинейностью.

Для того, чтобы найти энергетический спектр и собственные функции такого уравнения Шредингера, поступаем следующим образом. Сперва вводим вспомогательную скалярную функцию, которая играет роль классической гамильтоновой функции.

Затем ищется каноническое преобразование такое, что в новых канонически сопряженных переменных классическая гамильтонова функция является нормальной формой Биркгофа-Густавсона [10,11].

*

С помощью правила соответствия Вейля строится квантовая нормальная форма Биркгофа-Густавсона в виде дифференциальных выражений, которая дает приближенное выражение для оператора Гамильтона в первоначальном уравнении Шредингера. Задача на собственное значение так полученной квантовой нормальной формы Биркгофа-Густавсона легко решается, и ее решение в виде аналитической формулы дает нам приближенный спектр энергий исходного гамильтониана.

В работе для указанных выше частных видов оператора Гамильтона выполнены численные расчеты энергетических спектров и проведено сравнение с известными результатами других авторов [14].

Несмотря на частный выбор оператора Гамильтона, предложенный подход применим для широкого класса операторов Гамильтона, хотя и ограничен достаточно малой его нелинейной частью, может быть, в частности, применен к системам более высокой размерности.

КЛАССИЧЕСКАЯ И КВАНТОВАЯ НОРМАЛЬНАЯ ФОРМА БИРКГОФА-ГУСТАВСОНА.

Рассмотрим уравнение Шредингера

$$\hat{H}_{\mu}\psi(q) = E\psi(q), \qquad (\mu = 4,6,8), \tag{1}$$

где гамильтониан выбран в следующей форме

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

α – произвольный параметр.

Для решения дифференциального уравнения (1), (2) вводим вспомогательную функцию, которая рассматривается как классическая гамильтонова функция

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

где p и q – канонически сопряженные импульс и координата.

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

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

приводим классическую гамильтоновую функцию (3) к нормальной форме Биркгофа - Густавсона $H(q,p) \to \Gamma(\xi,\eta)$.

Как известно [11], гамильтонова функция $\Gamma(\xi,\eta)$ имеет нормальную форму, если выполняется условие

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

где дифференциальное выражение

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

называется оператором нормальной формы.

Производящая функция (4) удовлетворяет уравнениям

$$p = \eta + \frac{\partial W(q,\eta)}{\partial q}, \quad \xi = q + \frac{\partial W(q,\eta)}{\partial \eta}, \tag{6}$$

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

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

$$H(p,q)=\sum_{S\geq 2}H^{(S)}(q,p), \qquad H^{(S)}(q,p)=\sum_{l+m=S}h_{lm}q^l p^m, \tag{7}$$

$$\Gamma(\xi,\eta)=\sum_{S\geq 2}\Gamma^{(S)}(\xi,\eta), \qquad \Gamma^{(S)}(\xi,\eta)=\sum_{l+m=S}\gamma_{lm}\xi^l\eta^m, \tag{8}$$

$$W(q,\eta)=\sum_{S\geq 2}W^{(S)}(q,\eta), \qquad W^{(S)}(q,\eta)=\sum_{l+m=S}w_{lm}q^l\eta^m. \tag{9}$$

Здесь величины h_{lm} известны, но γ_{lm} и w_{lm} являются неизвестными коэффициентами, которые должны быть вычислены. В соответствии со статьей Густавсона [11] для нахождения s порядка нормальной формы $\Gamma^{(S)}$ и соответствующего производящего полинома $W^{(S)}$, то есть коэффициентов γ_{lm} и w_{lm}, нужно решить основное дифференциальное уравнение

$$DW^{(S)}(q,\eta)=-H^{(S)}(q,\eta)+\Gamma^{(S)}(q,\eta), \quad s=2,3,... \tag{10}$$

При помощи символьной REDUCE программы [12] получаем таким образом производящий полином $W(q,\xi)$ и нормальную форму $\Gamma(\xi,\eta)$, которая будет представлена в виде суммы однородных полиномов разных степеней по переменным ξ и η.

Для получения квантового аналога нормальной формы удобно ввести новые комплексные канонически сопряженные переменные

$$z=\frac{1}{\sqrt{2}}(\eta+i\xi), \qquad z^*=\frac{1}{\sqrt{2}}(\eta-i\xi) \tag{11}$$

и представить классическую нормальную форму следующим образом:

$$\Gamma_S=\sum_k\lambda_k z^k z^{*k}. \tag{12}$$

При построении квантового аналога $\hat{\Gamma}_S$ нормальной формы (12) используется правило сопоставления Вейля [13], которое каждому моному $z^{*n}z^m$ сопоставляет определенное дифференциальное выражение

$$z^{*n}z^m\equiv z^m z^{*n}\to\frac{1}{2^m}\sum_{l=0}^{m}\frac{m!}{l!(m-l)!}\hat{a}^{+l}\hat{a}^{n}\hat{a}^{+(m-l)}, \tag{13}$$

где операторы a, a определяются соотношениями

$$\hat{a}^{+}=\frac{1}{i\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi}-\xi\right), \qquad \hat{a}=\frac{1}{i\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right), \qquad \hat{N}=\hat{a}^{+}\hat{a}=-\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{d\xi^2}-\xi^2+1\right). \tag{14}$$

В результате классической нормальной форме Биркгофа-Густавсона (12) будет сопоставлен следующий дифференциальный оператор

$$\hat{\Gamma}_S=\sum_k A_{2k}\left(\frac{d^2}{d\xi^2}-\xi^2+1\right)^k. \tag{15}$$

Дифференциальный оператор (15) в виде ряда приближенно представляет начальный гамильтониан (2) уравнения Шредингера.

Таким образом, решение задачи на собственные значения

$$\hat{\Gamma}_S \Phi(\xi) = \lambda \Phi(\xi), \tag{16}$$

где величины λ и $\Phi(\xi)$ являются собственными значениями и функциями, соответственно, представляют собою приближенное решение уравнения Шредингера (1) с гамильтонианом (2). И задача (16) легко решается. Действительно, полиномы Чебышева-Эрмита есть собственные функции для любой степени дифференциального оператора $\hat{N} = \hat{a}^{+} \hat{a}$, а следовательно, и для всего дифференциального выражения (15). Таким образом, собственные значения λ уравнения (16) приближенно определяют энергетический спектр Е исходного уравнения Шредингера (1).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ ГАМИЛЬТОНИАНА (2).

Приведем результаты вычислений классической и квантовой нормальной формы, а также энергетических спектров уравнения (1) с гамильтонианом (2) с $\mu = 4,6,8$.

ДЛЯ ГАМИЛЬТОНИАНА (2) С $\mu = 4$

$$\hat{H}_4 = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dq^2} + \frac{q^2}{2} + \alpha q^4, \tag{2a}$$

вспомогательная гамильтонова функция (3) будет представлена следующей суммой

$$H(q,p) = H^{(2)} + H^{(4)}, \quad H^{(2)} = \frac{1}{2}(p^2+q^2), \quad H^{(4)} = \alpha q^4 . \tag{3a}$$

При помощи символьной REDUCE программы [12] получена до порядка $s_{\max} = 12$ включительно классическая нормальная форма Биркгофа-Густавсона в виде

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

$$\Gamma^{(2)} = \frac{1}{2}(\xi^2+\eta^2), \qquad \Gamma^{(4)} = \frac{3}{8}\alpha(\xi^2+\eta^2)^2, \qquad \Gamma^{(6)} = -\frac{17}{32}\alpha^2(\xi^2+\eta^2)^3, \tag{17}$$

$$\Gamma^{(8)} = \frac{375}{256}\alpha^3(\xi^2+\eta^2)^4, \quad \Gamma^{(10)} = -\frac{10689}{2048}\alpha^4(\xi^2+\eta^2)^5, \quad \Gamma^{(12)} = \frac{87549}{4096}\alpha^5(\xi^2+\eta^2)^6,$$

которая в комплексных переменных z и z^* (11) перепишется следующим образом:

$$\Gamma_{12} = zz^* + \frac{3}{2}\alpha z^2 z^{*2} - \frac{17}{4}\alpha^2 z^3 z^{*3} + \frac{375}{16}\alpha^3 z^4 z^{*4} - \frac{10689}{32}\alpha^4 z^5 z^{*5} + \frac{87549}{64}\alpha^5 z^6 z^{*6}. \tag{18}$$

Применяя правило Вейля (13), получаем квантовую нормальную форму, равную

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

$$\hat{\Gamma}^{(2)} = \hat{N} + \frac{1}{2}, \qquad \hat{\Gamma}^{(4)} = \frac{3}{2}\alpha\left(\hat{N}^2 + \hat{N} + \frac{1}{2}\right), \quad \hat{\Gamma}^{(6)} = -\frac{17}{4}\alpha^2\left(\hat{N}^3 + \frac{3}{2}\hat{N}^2 + 2\hat{N} + \frac{3}{4}\right),$$

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

$$\hat{\Gamma}^{(10)} = -\frac{10689}{32}\alpha^4\left(\hat{N}^5 + \frac{5}{2}\hat{N}^4 + 10\hat{N}^3 + \frac{25}{2}\hat{N}^2 + \frac{23}{2}\hat{N} + \frac{15}{4}\right), \tag{19}$$

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

или

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

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

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

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

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

$$A_8 = \frac{375}{16}\alpha^3 - \frac{53445}{128}\alpha^4 + \frac{3064215}{128}\alpha^5,$$

$$A_{10} = -\frac{10689}{64}\alpha^4 + \frac{262647}{64}\alpha^5, \tag{20}$$

$$A_{12} = \frac{87549}{64}\alpha^5.$$

Дифференциальное выражение (20) приближенно представляет начальный гамильтониан (2а) уравнения Шредингера и тогда в соответствии с уравнением (16) его энергетический спектр E можно представить следующей формулой

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

где

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

$$E^{(6)} = -\frac{17}{4}\alpha^2\left(n^3 + \frac{3}{2}n^2 + 2n + \frac{3}{4}\right), \qquad E^{(8)} = \frac{375}{16}\alpha^3\left(n^4 + 2n^3 + 5n^2 + 4n + \frac{3}{2}\right), \tag{21}$$

$$E^{(10)} = -\frac{10689}{32}\alpha^4\left(n^5 + \frac{5}{2}n^4 + 10n^3 + \frac{25}{2}n^2 + \frac{23}{2}n + \frac{15}{4}\right),$$

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

ДЛЯ ГАМИЛЬТОНИАНА (2) С $\mu = 6$.

$$\hat{H}_6 = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dq^2} + \frac{q^2}{2} + \alpha q^6, \tag{2б}$$

вспомогательная гамильтонова функция (3) будет представлена следующей суммой

$$H(q,p) = H^{(2)} + H^{(6)}, \quad H^{(2)} = \frac{1}{2}(p^2 + q^2), \quad H^{(6)} = \alpha q^6. \tag{3б}$$

Для функции (3б) с помощью символьной REDUCE программы [6] получена до порядка $s_{\max} = 18$ классическая нормальная форма Биркгофа-Густавсона:

$$\Gamma_{18} = \sum_k \Gamma^{(4k+2)}, \quad (k = 0,...,4),$$

$$\begin{gathered}\Gamma^{(2)} = \frac{1}{2}(\xi^2 + \eta^2), \qquad \Gamma^{(6)} = \frac{5}{16}\alpha(\xi^2 + \eta^2)^3, \qquad \Gamma^{(10)} = -\frac{393}{512}\alpha^2(\xi^2 + \eta^2)^5, \\ \Gamma^{(14)} = \frac{14745}{4096}\alpha^3(\xi^2 + \eta^2)^7, \qquad \Gamma^{(18)} = -\frac{11451165}{524288}\alpha^4(\xi^2 + \eta^2)^9,\end{gathered} \tag{22}$$

которая в комплексных переменных z и z^* (11) перепишется как

$$\Gamma_{18} = zz^* + \frac{5}{2}\alpha z^3 z^{*3} - \frac{393}{16}\alpha^2 z^5 z^{*5} + \frac{14745}{32}\alpha^3 z^7 z^{*7} - \frac{11451165}{1024}\alpha^4 z^9 z^{*9}. \tag{23}$$

Используя правило сопоставления Вейля (13), из классической нормальной формы (23) получаем ее квантовый аналог в виде следующего дифференциального оператора

$$\hat{\Gamma}_{18} = \sum_k \hat{\Gamma}^{(4k+2)}, \quad (k = 0,...,4),$$

$$\begin{aligned} &\hat{\Gamma}^{(2)} = \hat{N} + \frac{1}{2}, \qquad \hat{\Gamma}^{(6)} = \frac{5}{2}\alpha\left(\hat{N}^3 + \frac{3}{2}\hat{N}^2 + 2\hat{N} + \frac{3}{4}\right), \\ &\hat{\Gamma}^{(10)} = -\frac{393}{16}\alpha^2\left(\hat{N}^5 + \frac{5}{2}\hat{N}^4 + 10\hat{N}^3 + \frac{25}{2}\hat{N}^2 + \frac{23}{2}\hat{N} + \frac{15}{4}\right), \\ &\hat{\Gamma}^{(14)} = \frac{14745}{32}\alpha^3\left(\hat{N}^7 + \frac{7}{2}\hat{N}^6 + 28\hat{N}^5 + \frac{245}{4}\hat{N}^4 + 154\hat{N}^3 + \frac{343}{2}\hat{N}^2 + 132\hat{N} + \frac{315}{8}\right), \\ &\hat{\Gamma}^{(18)} = -\frac{11451165}{1024}\alpha^4\left(\hat{N}^9 + \frac{9}{2}\hat{N}^8 + 60\hat{N}^7 + 189\hat{N}^6 + 903\hat{N}^5 + \frac{3591}{2}\hat{N}^4 + 3590\hat{N}^3\right. \\ &\qquad\qquad \left. + 3681\hat{N}^2 + \frac{5067}{2}\hat{N} + \frac{2835}{4}\right), \end{aligned} \tag{24}$$

или в виде

$$\hat{\Gamma}_{18} = \sum_k A_{2k}\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + 1\right)^k, \quad (k = 0,...,9),$$

$$
\begin{aligned}
A_0 &= \frac{1}{2}+\frac{15}{8}\alpha-\frac{5895}{64}\alpha^2+\frac{4644675}{256}\alpha^3-\frac{32464052775}{4096}\alpha^4,\\
A_2 &= 1+5\alpha-\frac{9039}{32}\alpha^2+\frac{486585}{8}\alpha^3-\frac{58023053055}{2048}\alpha^4,\\
A_4 &= \frac{15}{4}\alpha-\frac{9825}{32}\alpha^2+\frac{5057535}{64}\alpha^3-\frac{42151738365}{1024}\alpha^4,\\
A_6 &= \frac{5}{2}\alpha-\frac{1965}{8}\alpha^2+\frac{1135365}{16}\alpha^3-\frac{20554841175}{512}\alpha^4,\\
A_8 &= -\frac{1965}{32}\alpha^2+\frac{3612525}{128}\alpha^3-\frac{41121133515}{2048}\alpha^4,\\
A_{10} &= -\frac{393}{16}\alpha^2+\frac{103215}{8}\alpha^3-\frac{10340401995}{1024}\alpha^4,\\
A_{12} &= \frac{103215}{64}\alpha^3-\frac{2164270185}{1024}\alpha^4,\\
A_{14} &= \frac{14745}{32}\alpha^3-\frac{171767475}{256}\alpha^4,\quad A_{16}=-\frac{103060485}{2048}\alpha^4,\quad A_{18}=-\frac{11451165}{1024}\alpha^4.
\end{aligned}
\tag{25}
$$

Решение задачи на собственные значения для дифференциального оператора в форме
(24) или (25) определяет для исходного уравнения Шредингера (1) с гамильтонианом (2б) энергетический спектр E:

$$E = E^{(2)}+E^{(6)}+E^{(10)}+E^{(14)}+E^{(18)},$$

где

$$
\begin{aligned}
E^{(2)} &= n+\frac{1}{2},\qquad E^{(6)}=\frac{5}{2}\alpha\left(n^3+\frac{3}{2}n^2+2n+\frac{3}{4}\right),\\
E^{(10)} &= -\frac{393}{16}\alpha^2\left(n^5+\frac{5}{2}n^4+10n^3+\frac{25}{2}n^2+\frac{23}{2}n+\frac{15}{4}\right),\\
E^{(14)} &= \frac{14745}{32}\alpha^3\left(n^7+\frac{7}{2}n^6+28n^5+\frac{245}{4}n^4+154n^3+\frac{343}{2}n^2+132n+\frac{315}{8}\right),\\
E^{(18)} &= -\frac{11451165}{1024}\alpha^4\left(n^9+\frac{9}{2}n^8+60n^7+189n^6+903n^5+\frac{3591}{2}n^4+3590n^3\right.\\
&\qquad\left.+3681n^2+\frac{5067}{2}n+\frac{2835}{4}\right),\quad n=0,1,2,...
\end{aligned}
\tag{26}
$$

ДЛЯ ГАМИЛЬТОНИАНА (2) С $\mu=8$.

$$\hat{H}_8 = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dq^2}+\frac{q^2}{2}+\alpha q^8, \tag{2в}$$

вспомогательная гамильтонова функция (3) будет представлена следующей суммой

$$H(q,p)=H^{(2)}+H^{(8)},\quad H^{(2)}=\frac{1}{2}(p^2+q^2),\quad H^{(8)}=\alpha q^8. \tag{3в}$$

И для нее при помощи символьной REDUCE программы [12] получена до порядка $s_{\max}=14$ классическая нормальная форма Биркгофа-Густавсона:

$$
\begin{gathered}
\Gamma_{14}=\sum_k \Gamma^{(6k+2)}, \quad (k=0,\ldots,2), \\
\Gamma^{(2)}=\frac{1}{2}(\xi^2+\eta^2), \qquad \Gamma^{(8)}=\frac{35}{128}\alpha(\xi^2+\eta^2)^4, \\
\Gamma^{(14)}=-\frac{3985}{4096}\alpha^2(\xi^2+\eta^2)^7,
\end{gathered} \tag{27}
$$

которая в комплексных переменных z и z^* (11) принимает вид

$$
\Gamma_{14}=zz^*+\frac{35}{128}\alpha z^4 z^{*4}-\frac{3985}{4096}\alpha^2 z^7 z^{*7}. \tag{28}
$$

Соответствующий квантовый аналог, построенный по правилу Вейля (13), равен

$$
\begin{gathered}
\hat{\Gamma}_{14}=\sum_k \hat{\Gamma}^{(6k+2)}, \quad (k=0,\ldots,2), \\
\hat{\Gamma}^{(2)}=\hat{N}+\frac{1}{2}, \qquad \hat{\Gamma}^{(8)}=\frac{70}{16}\alpha\left(\hat{N}^4+2\hat{N}^3+5\hat{N}^2+4\hat{N}+\frac{3}{2}\right), \\
\hat{\Gamma}^{(14)}=-\frac{3985}{32}\alpha^2\left(\hat{N}^7+\frac{7}{2}\hat{N}^6+28\hat{N}^5+\frac{245}{4}\hat{N}^4+154\hat{N}^3+\frac{343}{2}\hat{N}^2+132\hat{N}+\frac{315}{8}\right),
\end{gathered} \tag{29}
$$

который перепишем следующим образом:

$$
\begin{gathered}
\hat{\Gamma}_{14}=\sum_k A_{2k}\left(\frac{d^2}{d\xi^2}-\xi^2+1\right)^k, \quad (k=0,\ldots,7), \\
A_0=\frac{1}{2}+\frac{105}{16}\alpha-\frac{1255275}{256}\alpha^2, \qquad A_2=1+\frac{35}{2}\alpha-\frac{131505}{8}\alpha^2, \\
A_4=\frac{175}{8}\alpha-\frac{1366855}{64}\alpha^2, \qquad A_6=\frac{35}{4}\alpha-\frac{306845}{16}\alpha^2, \\
A_8=\frac{35}{8}\alpha-\frac{976325}{128}\alpha^2, \qquad A_{10}=-\frac{27895}{8}\alpha^2, \\
A_{12}=-\frac{27895}{64}\alpha^2, \qquad A_{14}=-\frac{3985}{32}\alpha^2.
\end{gathered} \tag{30}
$$

Собственные значения дифференциального оператора (30), которые представляет спектр энергий для исходного уравнения Шредингера (1) с гамильтониан (2в), определяются формулой

$$
E=E^{(2)}+E^{(8)}+E^{(14)},
$$

где

$$E^{(2)} = n + \frac{1}{2}, \qquad E^{(8)} = \frac{70}{16}\alpha\left(n^4 + 2n^3 + 5n^2 + 4n + \frac{3}{2}\right),$$

$$E^{(14)} = -\frac{3985}{32}\alpha^2\left(n^7 + \frac{7}{2}n^6 + 28n^5 + \frac{245}{4}n^4 + 154n^3 + \frac{343}{2}n^2 + 132n + \frac{315}{8}\right). \qquad (31)$$

$$n = 0,1,2,...$$

В табл. приведены значения уровней энергии (E_s), рассчитанные по полученным нами формулам, и их значения, полученные прямым численным решением уравнения Шредингера (1) с гамильтонианами (2) ($\mu = 4,6,8$).

Таблица

Сравнение уровней энергии (E_s) уравнения Шредингера (1), вычисленных по формулам (21) $(\mu = 4)$, (26) $(\mu = 6)$, (31) $(\mu = 8)$ с их "точными" численными значениями (E_Q), взятыми из работы [14].

	$\mu = 4,\quad \alpha = 0.001$			$\mu = 6,\quad \alpha = 0.001$		
№	E_S	E_Q	$\varepsilon, \%$	E_S	E_Q	$\varepsilon, \%$
0	1.00074841	1.00074869	0.000027	1.0018325	1.00184881	0.0016
1	3.00373892	3.00373974	0.000027	3.0126676	3.01278096	0.0037
2	5.00971051	5.00971187	0.000027	5.0443989	5.04479992	0.0079
3	7.01865070	7.01865259	0.000027	7.1089462	7.11009285	0.0161
4	9.03054717	9.03054956	0.000026	9.2150878	9.21858174	0.0379
5	11.0453877	11.045390	0.000026	11.36604	11.3778086	0.1034
6	13.0631602	13.0631635	0.000026	13.553743	13.5931662	0.2900
7	15.0838527	15.0838565	0.000025	15.745868	15.8682886	0.7714
8	17.1074534	17.1074577	0.000025	18.452142	18.2054610	1.3540
9	19.1339507	19.1339554	0.000025	21.159875	20.6059773	2.6880
10	21.1633329	21.1633810	0.000024	24.220209	23.0704224	4.9838
	$\mu = 4,\quad \alpha = 0.01$			$\mu = 8,\quad \alpha = 0.0001$		
№	E_S	E_Q	$\varepsilon, \%$	E_S	E_Q	$\varepsilon, \%$
0	1.00734872	1.00737367	0.0024	1.0006562	1.00064636	0.001
1	3.03645611	3.03652530	0.0023	3.0055383	3.00572695	0.006
2	5.09383639	5.09393913	0.0020	5.0241358	5.02539496	0.025
3	7.17844857	7.17857318	0.0017	7.0705589	7.07666897	0.08
4	9.28935275	9.28947981	0.0014	9.1557134	9.18025674	0.26
5	11.4257034	11.4257926	0.0008	11.270799	11.3561544	0.75

Из табл. видно, что значения уровней энергии, полученные предложенным методом, находятся в хорошем согласии ($\varepsilon(\%)$ означает относительную ошибку) с результатами, полученными прямым численным решением исходного уравнения Шредингера (1) с гамильтонианом в виде (2), по крайней мере, для нижайших уровней.

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

Список литературы

1. R.T. Swimm, and J.B. Delos, J. Chem. Phys., 71, 1706 (1979).
2. Ch. Jaffe, and W.P. Reinhardt, J. Chem. Phys., 77, 5191 (1982).
3. R.B. Shirts, and W.P. Reinhardt, J. Chem. Phys., 77, 5204 (1982).
4. M. Robnik, J. Phys. A: Math. Gen., 17, 109 (1984).
5. T. Uzer, and R.A. Marcus, J. Chem. Phys., 81, 5013 (1984).
6. Н.А. Чеканов. Ядерная физика, т. 50, 344 (1989).
7. D. Farrelly, T. Uzer, P.E. Raines et. al. Phys. Rev., A 45, 4738 (1992).
8. M.K. Ali, J. Math. Phys., 26, 2565 (1985).
9. А.А. Гусев, В.В. Красильников, Н.А. Чеканов. Журнал физ. хим. т. 74, 101 (2000).
10. Дж. Биркгоф. Динамические системы. Москва-Ижевск, НИЦ "РХД", 2002.
11. F.G. Gustavson, The Astronomical Journal, 71, 670 (1966).
12. V. Basios, N.A. Chekanov, B.L. Markovski, et. al.. Comp. Phys. Commun., 90, 355 (1995).
13. Г. Вейль. Теория групп и квантовая механика. М.: Наука, 1986. (Dover Publications, New York, 1931).
14. K. Banerjee, S.P. Bhatnagar, V. Choudhry, and S.S. Kanwal, Proc. R. Soc. Lond., A360, 575(1978).

One approach to the solution the eigenvalue problem for the differential operator of the second order

N. Belajeva[1)], S.I. Vinitsky[2)], V.A. Rostovtsev[3)], N.A. Chekanov[1)]

[1)]Belgorod State University, Pobedy Str. 85, Belgorod, 308015, Russia
e-mail: chekanov@bsu.edu.ru

[2)]Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research ,
Dubna, Moscow Region, 141980, Russian
e-mail: vinitsky@thsun1.jinr.ru

[3)]Laboratory of Information Technology, Joint Institute for Nuclear Research ,
Dubna, Moscow Region, 141980, Russian

Abstract

By means of the normal form method an approach for finding eigenvalues and eigenfunctions of the differential operator, such as the Hamiltonian operator in the Schroedinger equation, is proposed. The general construction of solution is presented and, in detail, the investigation of the Hamiltonian operator for one-dimensional anharmonic oscillator

$H_{\mu}(q) = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dq^2} + \frac{q^2}{2} + \alpha q^{\mu}$, $\mu = 4,6,8$, is made. Using the REDUCE package system for partial type of the nonlinear Hamiltonian function analytical calculations are performed and formula for energy spectra are received. By these formula numerical calculations of energy spectra are performed. A comparison with known results of other authors is made and at least for lowest states a good agreement is found.