РЕШЕНИЕ C_{2v}, C_{3v}, C_{4v} СИММЕТРИЧНЫХ ДВУМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ ШРЕДИНГЕРА СИМВОЛЬНО-ЧИСЛЕННЫМ МЕТОДОМ САМОСОГЛАСОВАННОГО БАЗИСА

А.Н. Лукьяненко, Н.А. Чеканов

Белгородский государственный университет,

Студенческая 14, 308007 Белгород, Россия

makarenko@bsu.edu.ru, chekanov@bsu.edu.ru

Для решения стационарного уравнения Шредингера — основного уравнения нерелятивистской квантовой механики разработаны и применяются различные приближенные аналитические методы и прямые численные расчеты, так как точные в явном виде решения имеются для небольшого числа конкретных гамильтонианов. С учетом возможностей современных вычислительных компьютерных систем перспективными являются комбинированные методы, включающие аналитические преобразования исходной задачи с помощью символьных пакетов и с последующим численным решением преобразованной задачи.

В настоящем докладе на основе метода самосогласованного базиса, анонсированного в работе [1], разработан комплекс символьно-численных программ, с использованием которого найдены решения — спектр E и волновые функции $\psi(x,y)$ двумерного уравнения Шредингера

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+V(x,y)\right)\psi(x,y)=E\psi(x,y) \tag{1}$$

со следующими потенциалами полиномиального типа

$$V(x,y) = (\frac{a-a'}{2})x^2 + \frac{a}{2}y^2 + bx^2y^2 + c(x^2+y^2)^2, \quad (2)$$

$$V(x,y) = \frac{1}{2}(x^2+y^2) + b(x^2y - \frac{1}{3}y^3) + c(x^2+y^2)^2, \quad (3)$$

$$V(x,y) = \frac{1}{2}(x^2+y^2) + bx^2y^2 + c(x^2+y^2)^2, \quad (4)$$

где a, a', b, c — параметры. Параметры выбраны так, что поверхности потенциальной энергии (2), (3) и (4) имеют, соответственно, два, четыре и один локальные минимумы, а спектры являются дискретными.

Существо метода самосогласованного базиса в том, что по одной переменной изначально учитывается периодичность собственных функций, а по второй ведется численное интегрирование в соответствии с видом потенциальной части оператора Шредингера и с контролируемой точностью.

Так как функции (2), (3) и (4) являются инвариантными относительно преобразований дискретных групп C_{2v}, C_{3v} и C_{4v}, то классификация собственных значений и функций была выполнена по неприводимым представлениям этих групп. Группа C_{2v} имеет четыре одномерных неприводимых представлений A_1, A_2, B_1, B_2, группа C_{3v} — два одномерных A_1, A_2 и одно двумерное E, группа C_{4v} — четыре одномерных A_1, A_2, B_1, B_2 и одно двумерное E. Для каждого уравнения Шредингера и состояний всех типов методом самосогласованного базиса были получены соответствующие, в общем, бесконечные системы дифференциальных уравнений. С помощью разработанных символьно-численных программ найдены их решения (спектр и волновые функции) для нескольких первых десятков нижних состояний. Проведено сравнение некоторых полученных результатов с результатами, полученными нами, но другими методами.

Литература

1. *Виницкий С.И., Инопин Е.В., Чеканов Н.А.* Решение двумерного уравнения Шредингера в самосогласованном базисе // Препринт ОИЯИ, Р4-93-150, Дубна, 1993, 11 с.