

О ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КВАЗИСВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ

А.С.Бруев

На примере ангармонического осциллятора с квадратичной нелинейностью построена теория возмущений, предназначенная для расчета спектра квазисвязанных состояний и справедливая при произвольных значениях параметра связи задачи. Показано, что данная теория возмущений пригодна для определения аналитической зависимости энергии уровня от параметра связи. Рассмотрены способы ускорения сходимости приближений, заключающиеся в применении аппроксимант Паде или метода собственной энергии.

Задача об аналитическом расчете спектра квазисвязанных состояний гамильтониана представляет физический и практический интерес. Традиционные методы требуют проведения громоздких численных расчетов. Возможности аналитического решения ограничены отсутствием эффективных методов суммирования расходящихся рядов. В задаче о нахождении точечного спектра гамильтониана эффективными методами аналитического продолжения расходящегося ряда является метод Паде /1/ или метод Паде — Бореля /2/. При использовании этих методов в задаче о нахождении спектра квазисвязанных состояний приходится перестраивать степенное по параметру связи разложение энергии уровня по многозначным функциям /3/. Ниже построена теория возмущений, позволяющая с одинаковой простотой находить энергии как связанных, так и квазисвязанных состояний. Аналитическое продолжение при этом осуществляется с помощью простых алгебраических уравнений.

Рассмотрим спектр гамильтониана H одномерного ангармонического осциллятора с квадратичной нелинейностью $H = -\partial^2/\partial x^2 + x^2 + \lambda x^4$, где система единиц такова, что постоянные осциллятора $m = 1/2$, $k = 2$, постоянная Планка $\hbar = 1$. Следуя процедуре "нелинеаризации" /4/, находим

$$\varphi' - \varphi^2 = E - x^2 - \lambda x^4, \quad (1)$$

где E — собственное значение гамильтониана H , $\varphi(x)$ — логарифмическая производная решения соответствующего уравнения Шредингера. Для основного состояния решение уравнения (1) ищем в виде $\varphi(x) =$

$= \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^{2n+1}$. Тогда для коэффициентов c_n возникает система нелинейных рекуррентных соотношений

$3c_1 - c_0^2 = -1$, $5c_2 - 2c_0c_1 = -\lambda$, $7c_3 - 2c_0c_2 - c_1^2 = 0$, $9c_4 - 2c_0c_3 - 2c_1c_2 = 0$, ... с начальным условием $c_0 = E$.

Будем последовательно выражать коэффициенты c_n через энергию E . При этом уравнение $c_n(E) = 0$ определяет энергию уровня в n -ом приближении, когда в разложении $\varphi(x)$ учитываются первые n членов. В результате получаются следующие алгебраические уравнения

$$\begin{aligned} n=2: & 2E^3 - 2E - 3\lambda = 0; \\ n=3: & 17E^4 - 22E^2 - 18E\lambda + 5 = 0; \\ n=4: & 31E^5 - 50E^3 - 39E^2\lambda + 19E + 21\lambda = 0; \dots \end{aligned} \quad (2)$$

Найденные с помощью (2) последовательные приближения для энергии основного состояния при нескольких значениях параметра связи λ приведены в табл. 1, где для сравнения указаны данные численных расче-

тов /5-7/. Видно, что первые приближения рассматриваемого варианта теории возмущений сходятся к величинам, близким к численным значениям.

Таблица 1

Значения энергии основного состояния в различных приближениях
(для $\lambda < 0$ два значения соответствуют действительной и мнимой частям E_0)

λ	$E_0^{(2)}$	$E_0^{(3)}$	$E_0^{(4)}$	$E_0^{(1,1)}$	$\tilde{E}_0^{(4)}$	$E_0^{(числ)}$
1	1,4311271	1,3808212	1,3967248	1,3929047	1,3922921	1,3923516
0,5	1,2625511	1,2368870	1,2434697	1,2421259	1,2415253	1,2418541
0,2	1,1254188	1,1171423	1,1185607	1,1183532	1,1181111	1,1182927
- 0,2	0,78648255	0,77255965	0,82491816	0,78355794	0,81213995	0,7949
	0	0,13533793	0,09887331	0,10661283	0,1177952	0,0894
- 0,5	0,63127555	0,77953225	0,66959106	0,71640417	0,71346405	0,7229
	0,44218380	0,36110493	0,32435842	0,29389972	0,31804165	0,3515
- 1	0,75156357	0,80068910	0,71352945	0,76927134	0,72574355	0,7477
	0,73218417	0,56977335	0,63523726	0,61643077	0,61115114	0,6100
$\lambda \rightarrow \infty$	$1,1447142\lambda^{1/3}$	$1,0192355\lambda^{1/3}$	$1,079529\lambda^{1/3}$	$1,0599604\lambda^{1/3}$	$1,0660537\lambda^{1/3}$	$1,0603621\lambda^{1/3}$
$\lambda \rightarrow -\infty$	$0,5723571\lambda^{1/3}$	$0,50961775\lambda^{1/3}$	$0,5397645\lambda^{1/3}$	$0,5299802\lambda^{1/3}$	$0,53302685\lambda^{1/3}$	$0,53018105\lambda^{1/3}$
	$0,99135158\lambda^{1/3}$	$0,88268384\lambda^{1/3}$	$0,93489954\lambda^{1/3}$	$0,91795264\lambda^{1/3}$	$0,92322959\lambda^{1/3}$	$0,91830052\lambda^{1/3}$

Установим некоторые свойства решений алгебраических уравнений (2). Для корней $E_k^{(n)}(\lambda)$ выполняется соотношение $E_k^{(n)}(-\lambda) = -E_k^{(n)}(\lambda)$, так что при расчете спектра достаточно рассмотреть значения $\lambda > 0$. Можно проверить, что число комплексных корней при значении $n \geq 2$ всегда равно двум, причем один из двух комплексно-сопряженных корней при $\lambda < 0$ соответствует квазисвязанному состоянию. Для данного n комплексные корни имеются только при выполнении условия $|\lambda| > \lambda_n$, где $\lambda_n < \lambda_{n-1} < \lambda_{n-2} \dots$ и, например $\lambda_2 = 0,25660012$, $\lambda_3 = 0,14920126$, $\lambda_4 = 0,11218728$. Число действительных корней равно $n - 1$, причем среди них физический смысл при $\lambda > 0$ имеет лишь один наибольший корень. Остальные соответствуют "нефизическим" ветвям многозначной функции $E_0(\lambda)$. Отметим, что если решение уравнения $s_n(E) =$

$= 0$ искать в виде степенного по λ разложения $E = \sum_{k=0}^{\infty} E_k \lambda^k$, то первые n коэффициентов E_k совпадут с

известными коэффициентами ряда по параметру связи энергии уровня /8/.

Рассмотрим характер пересечения ветвей функции $E_0(\lambda)$ в комплексной λ плоскости в зависимости от порядка приближения n данной теории возмущений. На рис. 1 показаны зависимости $E_k^{(n)}(\lambda)$ для значений $n=2$ при действительных значениях параметра связи. Для $n=2$ имеются две точки ветвления второго порядка, расположенные симметрично относительно начала координат при $\lambda = \pm \lambda_2$. Для $n=3$ эти точки ветвления расположены ближе к началу при $\lambda = \pm \lambda_3$. Кроме этого, появляются еще две точки ветвления, соответствующие минимальным значениям λ и расположенные при $\lambda = \lambda_{3,1} = \pm 1,2436086i$, им отвечает пересечение корней $E_2^{(2)}$ и $E_3^{(2)}$ при $\lambda = \lambda_{3,1}$. Можно показать, что для $n=4$ точкам ветвления на действительной оси соответствуют значения $\lambda = \pm \lambda_4$. Имеются также еще две пары симметричных относительно начала координат точек ветвления с координатами $\lambda = \pm 0,40740328 \pm 0,605339411i$. Таким образом, заключаем, что с ростом порядка приближения с увеличением числа корней уравнения $s_n(E) = 0$ увеличивается и чис-

ло точек ветвления с симметричным накоплением вблизи начала координат. Такое поведение корней алгебраических уравнений (2) согласуется с поведением функции $E_0(\lambda)$, изученном в /8/.

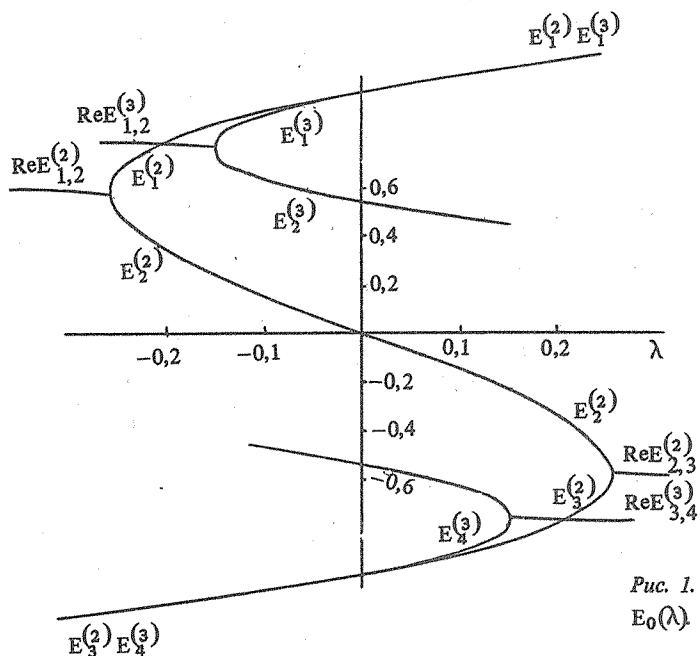


Рис. 1. Различные приближения для многозначной функции $E_0(\lambda)$.

Сравнение значений λ_n показывает, что с ростом n скорость сходимости приближений уменьшается. Простейший способ ускорения сходимости — применение аппроксимант Паде /9/. Используя (1,1) аппроксимант Паде найдено, что для значений $\lambda > 0$ величины $E_0^{(1,1)}(\lambda)$ (они приведены в табл. 1) ближе к численным значениям по сравнению с результатом приближения четвертого порядка.

Эффективным способом ускорения сходимости является метод собственной энергии /10/. Чтобы применить этот метод, перепишем систему уравнений для c_n в псевдолинейной форме: $3c_1 + (\frac{1}{E} - E)c_0 = 0$; $5c_2 - 2Ec_1 + \frac{\lambda}{E}c_0 = 0$; $7c_3 - 2Ec_2 - \frac{1}{3}(E^2 - 1)c_1 = 0$; $9c_4 - 2Ec_3 - \frac{2}{3}(E^2 - 1)c_2 = 0$; ..., где использованы выражения $c_n(E)$ и начальное условие $c_0 = E$. Следуя /10/, получаем записанное в виде разложения уравнение для энергии уровня

$$\left(\frac{1}{E} - E\right) + 3\lambda/E^2 - 5(E^2 - 1)\lambda/8E^4 + 35(E^2 - 1)^2\lambda/48E^6 - \dots = 0, \quad (3)$$

где первый член соответствует G_{00}^{-1} — обратному значению диагонального матричного элемента свободной функции Грина, а остальные члены ряда — членам $\Sigma_{00}^{(n)}$ степенного разложения собственной энергии $\Sigma_{00}(g)$ в ряд по константе связи g (в уравнении (3) $g = 1$). С помощью (3) можно показать, что первое уравнение в (2) получается при простейшей аппроксимации собственной энергии, когда $\Sigma_{00} \approx \Sigma_{00}^{(1)}$. Следующие уравнения описываются более сложными аппроксимациями:

$$\Sigma_{00} \approx \Sigma_{00}^{(1)} [1 - \Sigma_{00}^{(2)}/\Sigma_{00}^{(1)}]^{-1}; \quad (4)$$

$$\Sigma_{00} \approx \Sigma_{00}^{(1)} [1 - \Sigma_{00}^{(3)}/\Sigma_{00}^{(2)}] [1 - \Sigma_{00}^{(2)}/\Sigma_{00}^{(1)} - \Sigma_{00}^{(3)}/\Sigma_{00}^{(2)}]^{-1}. \quad (5)$$

Смысл этих аппроксимаций заключается в приближенном учете первого полюса в комплексной плоскости значений константы связи, где собственная энергия является мероморфной функцией /10/. (Для некото-

рых точно решаемых задач полюсная аппроксимация (4) эквивалентна известному uv – преобразованию Боголюбова /11/. Поскольку положение первого полюса мероморфной функции $f(z)$ определяется пределом отношения $f^{(n+1)}/f^{(n)}$ при $n \rightarrow \infty$ ее коэффициентов в разложении Тейлора /12/, вместо (5) лучше применять аппроксимацию /11, 12/: $\Sigma_{00} \approx \Sigma_{00}^{(1)} + \Sigma_{00}^{(2)} [1 - \Sigma_{00}^{(3)} / \Sigma_{00}^{(2)}]^{-1}$. В таком приближении получаем алгебраическое уравнение пятой степени

$$52E^5 - 80E^3 - 63\lambda E^2 + 28E + 27\lambda = 0. \quad (6)$$

С помощью (6) находим значение $\tilde{\lambda}_4 = 0,09200727$, которое меньше значения λ_4 . Приведем координаты других точек ветвления $\lambda = \pm 0,48578668 \pm 0,32666691i$. Данные расчета энергии основного состояния по уравнению (6) приведены в табл. 1.

Меняя форму разложения $\varphi(x)$, аналогичным образом можно рассмотреть возбужденные состояния.

Например, для первого возбужденного состояния следует использовать разложение $\varphi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^{2n-1}$.

Для него погрешность приближений оказывается примерно такой же, как и для основного состояния.

В заключение отметим, что данный вариант теории возмущений обладает рядом преимуществ по сравнению с известными. В частности, не требуется знать решение задачи для "невозмущенного" гамильтониана, в результате расчета получаются собственные функции как обладающие, так и не обладающие квадратичной интегрируемостью. Поэтому решение данным методом таких задач, где базисные функции нулевого приближения не являются ортогональными или квадратично интегрируемыми, будет более простым по сравнению с традиционными способами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Loeffel J. J. et al. Phys. Lett., 30B, 656 (1969).
2. Graffi S., Grecchi V., Simon B. Phys. Lett., 32B, 631 (1970).
3. Сергеев А. В., Шерстюк А. И. ЖЭТФ, 82, 1070 (1982).
4. Долгов А. Д., Попов В. С. ЖЭТФ, 75, 2010 (1978).
5. Biswas S. N. et al. J. Math. Phys., 14, 1190 (1973).
6. Drummond J. E. J. Phys., A15, 2321 (1982).
7. Hioe F. T., MacMillen D., Montroll E. W. Phys. Rep., 43, 305 (1978).
8. Bender C. M., Wu T. T. Phys. Rev., 184, 1231 (1969); Shanley P. Phys. Lett., A117, 161 (1986).
9. Бейкер Дж., Грейвс-Моррис П. Аппроксимации Паде. М., Мир, 1986.
10. Бруев А. С. Препринт ФИАН № 121, М., 1981; Ядерная физика, 37, 1469 (1983).
11. Бруев А. С. Краткие сообщения по физике ФИАН № 4, 12 (1983).
12. Бруев А. С. Препринт ФИАН № 46, М., 1981; Краткие сообщения по физике ФИАН, № 4, 12 (1982).

Институт общей физики АН СССР

Поступила в редакцию 11 декабря 1987 г.