

Алгоритм расчета энергетического спектра связанных ангармонических осцилляторов

Иванов А.А.

Белорусский национальный технический университет

В работе рассмотрен наиболее общий случай взаимодействующих квантовых ангармонических осцилляторов с гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2} p_x^2 + \frac{1}{2} p_y^2 + \frac{1}{2} (x^2 + \Omega^2 y^2) + \lambda xy + Ax^4 + By^4 + Cx^2 y^2$$

Здесь A, B, C – безразмерные параметры ($A, B > 0; C > 2\sqrt{AB}$), причем для общности рассмотрения введено не только квадратичное взаимодействие между осцилляторами, но и линейное, которое существенно при моделировании некоторых видов молекулярных или решеточных потенциалов.

Построение энергетического спектра системы проведено с помощью операторного метода решения уравнения Шредингера. Вначале осуществлен переход к представлению вторичного квантования, далее в полном гамильтониане выделена часть H_0 , коммутирующая с операторами числа частиц.

Полученные промежуточные собственные значения оператора H_0 фактически играют только промежуточную роль и ведут к соответствующему нулевому приближению.

Подчеркнем: в случае идентичных осцилляторов ($A = B, \Omega = 1$) у гамильтониана появляется дополнительный интеграл движения, обусловленный перестановочной симметрией. В соответствии с общими правилами операторного метода точные интегралы движения должны быть учтены уже в нулевом приближении для того, чтобы корректно описать условия вырождения энергетического спектра.

Частично это вырождение снимается преобразованием вращения координат. Это приводит к появлению несимметричного относительно перестановки $N \leftrightarrow M$ слагаемого. Однако, он пропорционален параметру λ линейной связи и в случае важного частного случая только четных степеней операторов координат осцилляторов указанное вырождение остается. Тогда необходимо составить «правильную линейную комбинацию» вырожденных волновых функций нулевого приближения. Этот подход приводит к получению равномерно пригодного приближения в нулевом порядке операторного метода для энергии взаимодействующих осцилляторов, совпадающего в предельных случаях с известными результатами.