

**Исследование скорости сходимости последовательных приближений  
операторного метода в зависимости от выбора нулевого  
приближения**

Иванов А.А.

Белорусский национальный технический университет

В работе рассматривается операторный метод приближенного решения уравнения Шредингера, который позволяет получить равномерно пригодное приближения для энергетического спектра квантовых систем во всем диапазоне изменения параметров их гамильтонианов. Получаемые аналитические аппроксимации операторного метода обладают высокой точностью уже в нулевом приближении, переходят в простые формулы в предельных случаях. Целью работы является определение такого нулевого приближения, которое обеспечивало бы наилучшую скорость схождения последующих аппроксимаций.

Требуется заметить, что строгого математического доказательства сходимости последовательных приближений операторного метода ни в данной работе, ни в работах других авторов не получено. Можно лишь проводить численные расчеты и анализировать скорость сходимости последующих приближений к известным численным результатам. Исследования проводятся на примере ангармонического осциллятора: известной системе, которая как правило применяется для проверки пригодности методов приближенного решения уравнения Шредингера.

Показано, что наилучшая точность в нулевом приближении достигается при включении в гамильтониан нулевого приближения  $\hat{H}_0$  всех слагаемых полного гамильтониана  $\hat{H}$ , коммутирующих с оператором числа возбуждений  $\hat{n}$ . Такой выбор гамильтониана  $\hat{H}_0$  аналогичен известному методу Хартри-Фока.

При построении приближения как их сходимость, так и скорость сходимости зависят от параметра  $\omega$ , значение которого, вообще говоря, зависит от параметров гамильтониана и номера квантового состояния. Показано, что при выборе значения этого параметра из условия наилучшей точности в нулевом приближении приводит к тому, что последовательные приближения сходятся примерно как геометрическая прогрессия со знаменателем  $1/3$ , а при специальном выборе значения параметра  $\omega$  – как геометрическая прогрессия со знаменателем  $1/8$ . Таким образом, в работе описана методика как получения наивысшей точности в нулевом приближении, так и наиболее быстрой сходимости последующий приближений.