УДК 539.22

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-23-37

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЫ В ПОЛЕ ДВУМЕРНОГО ДИПОЛЯ

Коваль О. А.¹, Коваль Е. А.²

¹ *Институт физики атмосферы им. А. М. Обухова Российской академии наук
119017, г. Москва, Пыжевский пер., д. 3, Российская Федерация*

² *Объединенный институт ядерных исследований
141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6, Российская Федерация*

Аннотация.

Целью работы является численное исследование энергетических уровней связанных состояний квантовой частицы в поле двумерного диполя с помощью предложенного численного алгоритма для решения двумерного уравнения Шредингера.

Процедура и методы. С помощью специального разложения волновой функции двумерное уравнение Шредингера сведено к решению краевой задачи Штурма-Лиувилля для системы дифференциальных уравнений. Для решения задачи поиска собственных значений матрицы, получаемой при конечно-разностной аппроксимации производных, применён метод обратных итераций со сдвигом.

Результаты. Определены значения уровней энергии и соответствующие им собственные волновые функции квантовой частицы в поле двумерного диполя.

Теоретическая и/или практическая значимость. С помощью предложенного численного алгоритма с хорошей точностью получены значения энергетических уровней связанных состояний квантовой частицы в поле двумерного диполя. Получено согласие с результатами других авторов, использовавших вариационный подход, для которого отсутствуют оценки ошибок вычисленных значений относительно истинного решения. Выполненные нами расчёты с известной оценкой точности восполняют этот пробел.

Ключевые слова: двумерное уравнение Шредингера, анизотропные взаимодействия, численный алгоритм

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-32-80003).

NUMERICAL ANALYSIS OF ENERGY LEVELS OF QUANTUM PARTICLE IN FIELD OF TWO-DIMENSIONAL DIPOLE

O. Koval¹, E. Koval²

¹ *A. M. Obukhov Institute of Atmospheric Physics of Russian Academy of Sciences
3 Pyzhevsky pereulok, Moscow 119017, Russian Federation*

² *Joint Institute for Nuclear Research
6 ulitsa Joliot-Curie, Dubna 141980, Moscow Region, Russian Federation*

Abstract.

Aim of the paper is a numerical investigation of energy levels of a quantum particle in a field of a two-dimensional dipole, based on the numerical algorithm proposed for solving the full two-dimensional Schrödinger equation.

Methodology. With the help of special expansion of a wave function the two-dimensional Schrödinger equation was transformed to the Sturm-Liouville boundary problem for the system of differential equations. The method of inverted iterations with a shift was applied to the matrix eigenvalues search problem, that was obtained after a finite-difference approximation of the derivatives.

Results. The low-lying energy levels and the corresponding wave functions of a quantum particle in a field of a two-dimensional dipole were determined.

Research implications. The energy levels of bound states of a quantum particle in a field of a two-dimensional dipole were obtained using the proposed numerical algorithm. The agreement was obtained with the work of other author, where the variational approach was used, for which there is no error estimates of the calculated values relative to the exact solution. The calculations that were carried out by us with known convergence and error estimates fill this gap.

Keywords: two-dimensional Schrödinger equation, anisotropic interactions, numerical algorithm

Acknowledgments. This research was supported by the Russian Fund for Basic Research (grant No. 19-32-80003).

Введение

Физика дипольных систем активно развивалась последние годы [1–4]. В ряде работ (напр. [1; 2]) экспериментально получены ультрахолодные газы (в том числе с диполь-дипольным взаимодействием [2]) в квази-двумерных геометриях дископодобных ловушек, движение частиц в которых близко к движению в плоскости. Дипольное взаимодействие имеет дальнодействующий и анизотропный характер, что влияет на свойства системы, как это было обнаружено в физике ультрахолодных атомов и полярных молекул в квази-двумерных и трёхмерных геометриях оптических ловушек [5], атомов Ридберга во внешних полях [6], экзотических стабильных конфигурациях в ультрахолодных газах [7], и в экспериментальных исследованиях нематических жидких кристаллов во внешних магнитных полях [8].

Целью работы является численный анализ уровней энергии связанных состояний квантовой частицы в поле двумерного диполя [9; 10]. Потенциал взаимодействия частицы с силовым центром $V_p(\rho, \varphi)$ описывается нецентральный потенциалом вида [9]:

$$V_p(\rho, \varphi) = p \frac{\cos(\varphi)}{\rho}, \quad (1)$$

где ρ и φ – полярные координаты, определённые в плоскости XY ; p – величина эффективного дипольного момента. В электростатике такой потенциал может быть реализован как потенциал диполя, образованного двумя близкими беско-

нечными прямыми, с равными и противоположными линейными плотностями зарядов [9]. Форма потенциала представлена на рис. 1.

Рис. 1. / Fig. 1. Поверхность потенциальной энергии $V_p(x, y)$ (в единицах $E_p = 2mp^2/\hbar^2$) как функция координат x, y (в единицах $L = \hbar^2/2mp$). / The potential energy surface $V_p(x, y)$ (in units of $E_p = 2mp^2/\hbar^2$) as a function of x, y coordinates (in units $L = \hbar^2/2mp$).

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Для решения задач с анизотропным потенциалом, в которых переменные не разделяются, необходимы численные алгоритмы, позволяющие решать двумерное уравнение Шредингера без дополнительных аппроксимаций, таких как учёт анизотропной части потенциала по теории возмущений или пренебрежение вкладами высших парциальных волн при низких энергиях столкновений.

В частности, потенциал не допускает разделения переменных, вследствие чего в ряде работ использованы аналитические и численные методы, развитые для анализа радиальных уравнений в рамках различных приближений (например, метод асимптотических итераций [11], квазиклассическое приближение [12], метод фазовых функций [13]). Нами предложен численный алгоритм для точного решения соответствующего двумерного уравнения Шредингера [9] для точечной частицы массы m в поле диполя:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + V_p(\rho, \phi) \right] \Psi(\rho, \phi) = E \Psi(\rho, \phi). \quad (2)$$

В единицах длины $L = \frac{\hbar^2}{2mp}$ и энергии $E_p = \frac{2mp^2}{\hbar^2}$; $\epsilon \equiv E/E_p$ двумерное урав-

нение Шредингера с потенциалом может быть записано в безразмерном виде:

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos(\varphi)}{\rho} \right] \Psi(\rho, \varphi) = \epsilon \Psi(\rho, \varphi). \quad (3)$$

Потенциал инвариантен относительно отражения относительно оси X $V_p(\rho, \varphi) = V_p(\rho, -\varphi)$, и благодаря этой симметрии потенциала связанные состояния являются либо чётными $\Psi(\rho, \varphi) = \Psi(\rho, -\varphi)$ либо нечётными $\Psi(\rho, \varphi) = -\Psi(\rho, -\varphi)$. Для $p > 0$ потенциал является притягивающим в области $x < 0$.

Как отмечено в работе [9], начиная с начальной оценки Ландауэра энергии основного состояния ($E = -0,102E_p$) [14], другими авторами предпринято несколько попыток расчёта уровней энергии и собственных функций системы в вариационном подходе с различными базисными функциями [14–19].

В работе [9] представлено сравнение результатов нескольких методов диагонализации матриц, полученных конечно-разностной дискретизацией двумерного уравнения Шредингера на сетках по пространственным координатам, в частности, метода сопряжённых градиентов, алгоритма Якоби-Дэвидсона и алгоритма Арнольди-Ланцоша. Авторами [9] отмечено, что дискретизация по пространственным координатам и применение методов диагонализации матриц предпочтительнее для низколежащих состояний, чем вариационные исследования, но наилучшее значение энергии основного состояния ($E = -0,139E_p$) было рассчитано с помощью конечно-разностной дискретизации по пространственным координатам только с 2%-ной точностью. В работе [10] авторами показано, что вариационный метод Релея-Ритца быстрее сходится по числу K базисных функций при разложении волновой функции по двумерным аналогам орбиталей слейтеровского типа, чем при использовании в качестве базисных функций волновых функций «двумерного атома водорода». Проверка того, что причиной этого факта является неполнота базиса используемых функций, выполнена в работе [20], где разложение волновой функции произведено по полному базису с помощью метода полиномиальных ортогональных проекций, что уменьшило необходимое число вариационных параметров сходимости.

Алгоритм для численного решения задачи на связанные состояния для двухчастичных двумерных систем

Для решения двумерного уравнения Шредингера нами предложена вычислительная схема, основанная на методе обратных итераций со сдвигом и модификации метода представления дискретной переменной. Погрешность вычислений может контролироваться с помощью шага разностных сеток.

Для построения численного алгоритма решения двумерного уравнения с произвольным анизотропным потенциалом $V(\rho, \varphi)$ используется метод Мележика В. С. [21] для решения многомерной задачи рассеяния.

Для представления волновой функции на равномерной разностной сетке $\varphi_j = \frac{2\pi j}{2M+1}$ ($j = 0, 1, \dots, 2M$) по угловой переменной φ используются собственные функции:

$$\xi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im(\varphi-\pi)} = \frac{(-1)^m}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad (4)$$

оператора $h^{(0)}(\varphi) = \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$ в качестве Фурье базиса. Количество базисных

функций разложения волновой функции выбирается равным количеству точек разностной сетки по угловой переменной, что позволяет определить квадратную $(2M+1) \times (2M+1)$ матрицу $\xi_{jm} = \xi_m(\varphi_j)$ на разностной сетке по угловой переменной. С помощью соотношения полноты Фурье базиса

$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \xi_m(\varphi_k) \xi_m^*(\varphi_j) = \delta(\varphi_k - \varphi_j)$, которое на разностной сетке принимает вид:

$\sum_{m=-M}^M \xi_{km} \xi_{jm}^* = \frac{2M+1}{2\pi} \delta_{kj}$, элементы обратной матрицы ξ_{mj}^{-1} могут быть получены

в явном виде: $\xi_{mj}^{-1} = \frac{2\pi}{2M+1} \xi_{jm}^* = \frac{\sqrt{2\pi}}{2M+1} e^{-im(\varphi_j-\pi)}$.

Волновая функция представлена в виде разложения:

$$\Psi(\rho, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{m=-M}^M \sum_{j=0}^{2M} \xi_m(\varphi) \xi_{mj}^{-1} \psi_j(\rho). \quad (5)$$

Заметим, что радиальные функции $\psi_j(\rho)$ определяются значениями волновой функции в узлах разностной сетки φ_j :

$$\psi_j(\rho) = \sqrt{\rho} \Psi(\rho, \varphi_j). \quad (6)$$

Преимуществом используемого разложения по сравнению с вариационными исследованиями и разложением по парциальным волнам является наличие оценки погрешности аппроксимации [22]:

$$\delta\Psi(\rho, \varphi) = \left| \Psi(\rho, \varphi) - \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{m=-M}^M \sum_{j=0}^{2M} \xi_m(\varphi) \xi_{mj}^{-1} \psi_j(\rho) \right| < \text{const} \times \frac{\ln M}{M^k}, \quad (7)$$

где k – число непрерывных и ограниченных производных по φ . Быстрая скорость сходимости по числу точек сетки $2M+1$ по угловой переменной для потенциала продемонстрирована в табл. 3. Использование разложения по парциальным волнам для сильно анизотропных потенциалов неэффективно из-за большого числа требуемых базисных функций [23]. Особенностью вариационного подхода, часто используемого авторами [9; 10], является тот факт, что для него получаемые значения энергии являются оценкой сверху точного значения энергии системы и отсутствуют оценки ошибок вычисленных значений относительно истинного решения [24].

В представлении (5) уравнение Шредингера (2) преобразуется в систему $(2M+1)$ связанных дифференциальных уравнений второго порядка:

$$-\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \Psi_j(\rho) - \frac{1}{4\rho^2} \Psi_j(\rho) + \sum_{j'=0}^{2M} V_{jj'} \Psi_{j'}(\rho) - \frac{1}{\rho^2} \sum_{j'=0}^{2M} h_{jj'}^{(0)} \Psi_{j'}(\rho) = \epsilon \Psi_j(\rho), \quad (8)$$

где матрица потенциала диагональная и состоит из значений потенциала в узлах сетки по угловой переменной:

$$V_{jj'}(\rho) = V(\rho, \varphi_j) \delta_{jj'}, \quad (9)$$

если потенциал не содержит операторов интегрирования или дифференцирования. В случае их наличия требуется аппроксимация операторов интегрирования конечно-разностными аналогами, и матрица потенциала становится недиагональной.

Недиагональная матрица оператора $h^{(0)}$ определяется следующим образом:

$$h_{jj'}^{(0)} = - \sum_{j''=-M}^M j''^2 \xi_{jj''} \xi_{j''j'}^{-1}. \quad (10)$$

Постановка задачи помимо уравнения требует определения граничных условий на радиальные функции.

Левое граничное условие для радиальных функций $(\bar{\Psi}(\rho))_j = \Psi_j(\rho)$ определяется из условия конечности волновой функции в нуле $\left(\Psi(\rho, \varphi_j) = \frac{\Psi_j(\rho)}{\sqrt{\rho}} \rightarrow \text{const} \right)$

и имеет вид:

$$\Psi_j(\rho=0) = 0 \quad (j=0, 1, \dots, 2M), \quad (11)$$

правое – из условия стремления волновой функции к нулю на бесконечности:

$$\Psi_j(\rho \rightarrow \infty) \rightarrow 0 \quad (j=0, 1, \dots, 2M). \quad (12)$$

Для решения задачи на собственные значения (8), (11) и (12) вводится неравномерная сетка по радиальной переменной ρ : (по аналогии с квазиравномерными сетками [25]): $\rho_j = \rho_N t_j^2$, $(j=1, 2, \dots, N)$, узлы на которой определяются отображением $\rho_j \in [0, \rho_N \rightarrow \infty]$ на равномерную сетку $s_j \in [0, 1]$. Максимальный радиус сетки для потенциала, требующийся для расчёта энергий низколежащих связанных состояний, составил $\rho_N = 300$.

Для дискретизации используется семиточечная конечно-разностная аппроксимация шестого порядка точности для второй производной. На равномерной сетке узлов $\left\{ s_k = kh, h = \frac{s_N}{N}, k=1, 2, \dots, N-1 \right\}$, $\left\{ \Psi^k = \Psi(s_k) \right\}$ она имеет вид [26]:

$$\left. \frac{d^2 \Psi(s)}{ds^2} \right|_{s=s_k} = \frac{1}{180h^2} (2\Psi^{k-3} - 27\Psi^{k-2} + 270\Psi^{k-1} - 490\Psi^k + 270\Psi^{k+1} - 27\Psi^{k+2} + 2\Psi^{k+3}) + O(h^6). \quad (13)$$

В результате такой аппроксимации задача (8) сводится к линейным уравнениям вида:

$$a_k \psi^{k-3} + b_k \psi^{k-2} + c_k \psi^{k-1} + (d_k + E \cdot I) \psi^k + e_k \psi^{k+1} + f_k \psi^{k+2} + g_k \psi^{k+3} = h_k, \quad (14)$$

с диагональными матрицами $a_k, b_k, c_k, d_k, e_k, f_k, g_k$, (I – единичная матрица) и не-диагональной матрицей d_k , включающей матрицу $h^{(0)}$.

Собственные значения и соответствующие собственные векторы получаемой матрицы гамильтониана определяются численно с помощью метода обратных итераций со сдвигом [27].

Возникающая на каждой итерации алгебраическая задача решается с помощью матричной модификации алгоритма прогонки [28] для блок-диагональной матрицы.

Матрицы $a_k, b_k, c_k, d_k, e_k, f_k, g_k$ имеют блочную структуру, что позволяет оптимально использовать ресурсы. Быстрая сходимость по обратным итерациям подтверждается малым средним числом обратных итераций ≈ 10 .

Результаты

Предложенная вычислительная схема применена для расчёта уровней энергии точечной частицы в поле анизотропного двумерного дипольного потенциала и собственных функций низколежащих связанных состояний. Улучшена точность результатов недавних работ других авторов [10; 11; 20]. В табл. 1 приведено сравнение вычисленных с точностью до шести знаков после запятой уровней энергий ϵ_n пяти ($n = 1 - 5$) низколежащих чётных связанных состояний (3-й столбец) с результатами работ [10] и [11] других авторов, а в табл. 2 – сравнение вычисленных с точностью до семи знаков после запятой уровней энергий ϵ_n пяти ($n = 1 - 5$) низколежащих нечётных связанных состояний (3-й столбец) с результатами работ [11] и [20] других авторов. В [10] и [11] авторами использовались вариационные методы с разложением волновой функции по собственным функциям «двумерного атома водорода» [10] и по функциям слейтеровского типа [11]; в работе [20] – метод проекций волновой функции на ортогональные полиномы (“orthogonal polynomial projection quantization”).

Анализ табл. 1 и табл. 2 демонстрирует хорошее согласие с результатами работ [10; 11; 20] и применимость как используемой вычислительной схемы, так и вариационных методик для оценки основного и первых возбужденных состояний для описания систем с нецентральными потенциалами в плоскости.

На рис. 2 (а-д) приведены пространственные распределения плотности вероятности вычисленных пяти низколежащих чётных связанных состояний $n = 1, 2, \dots, 5$, а на рис. 3 (а-д) – нечётных связанных состояний $n = 1, 2, \dots, 5$. График распределений $n = 5$ чётного и нечётного возбужденных состояний существенно отличается от состояний $n < 5$: вместо дальнейшего появления дополнительных областей вдоль оси X распределения разделяются на дополнительные области по оси Y . Изменение формы распределения объясняется компенсацией сужения плотности распределения состояний ($n = 5$) по оси X растяжением вдоль оси Y и более компактными пространственными размерами всего распределения в

Таблица 1 / Table 1

Сравнение вычисленных нами значений уровней энергий ϵ_n (в ед. E_p) пяти низколежащих чётных связанных состояний (3-й столбец) с результатами работ [9; 10] других авторов / The comparison of the calculated values of energy levels ϵ_n (in units E_p) of five low-lying even bound states (3rd column) with the results of Refs. [10; 10] of the other authors.

n	$ \epsilon_n $ [9]	$ \epsilon_n $ [10]	$ \epsilon_n $
1	0,0970	0,137741	0,137748
2	0,0328	0,041152	0,041159
3	0,0221	0,019967	0,019974
4	0,0167	0,011852	0,011859
5	0,0119	0,009747	0,009747

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Таблица 2 / Table 2

Сравнение вычисленных нами значений уровней энергий ϵ_n (в ед. E_p) пяти низколежащих нечётных связанных состояний (3-й столбец) с результатами работ [10; 20] других авторов / The comparison of the calculated values of energy levels ϵ_n (in units E_p) of five low-lying odd bound states (3rd column) with the results of Refs. [10; 20] of the other authors.

n	$ \epsilon_n $ [9]	$ \epsilon_n $ [10]	$ \epsilon_n $
1	0,0232932	0,0232932	0,0232932
2	0,0125862	0,0125863	0,0125862
3	0,0079918	0,0079919	0,0079919
4	0,0055643	0,0055644	0,0055644
5	0,0053312	0,0053312	0,0053312

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

целом, по сравнению с распределениями $n = 4$ чётного и нечётного возбужденных состояний. Качественно оно объяснимо на примере связанных состояний точечной частицы в поле двумерного анизотропного ($\omega_x \ll \omega_y$) гармонического осциллятора (полная энергия которого $E = \hbar\omega_x(n_x + 1) + \hbar\omega_y(n_y + 1)$). Накопление квантов возбуждения происходит по переменной x пока выполняется $\hbar\omega_x(n_x + 1) < 2\hbar\omega_y$, после чего энергия увеличивается за счёт возбуждения по оси Y с изменением формы распределения и накопление продолжается по переменной X ($\hbar\omega_x(n_x + 1) < 2\hbar\omega_y$) и т.д.

В табл. 3 продемонстрирована быстрая сходимость уровней энергий ϵ_n ($n = 1 - 5$) низколежащих чётных связанных состояний по числу точек угловой сетки M : $M \approx 20$ точек достаточно для достижения точности в шесть знаков после запятой.

Рис. 2. / Fig. 2. Плотности вероятности $n = 1$ (а), 2 (б), 3 (в), 4 (г), 5 (д) низколежащих чётных связанных состояний. Области, обозначенные тёмным цветом, соответствуют большим значениям функции плотности вероятности. $L = \hbar^2/2mp$ – характерный линейный масштаб задачи. / Probability density plots of five ($n = 1$ (а), 2 (б), 3 (в), 4 (г), 5 (д)) low-lying *even* bound states. Dark regions correspond to high densities.

$L = \hbar^2/2mp$ – a length scale of a problem.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Рис. 3. / Fig. 3. Плотности вероятности $n = 1$ (а), 2 (б), 3 (в), 4 (г), 5 (д) низколежащих нечётных связанных состояний. Области, обозначенные тёмным цветом, соответствуют большим значениям функции плотности вероятности. $L = \hbar^2/2mp$ – характерный линейный масштаб задачи. / Probability density plots of five ($n = 1$ (а), 2 (б), 3 (в), 4 (г), 5 (д)) low-lying odd bound states. Dark regions correspond to high densities. $L = \hbar^2/2mp$ – a length scale of a problem.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Таблица 3 / Table 3

Зависимость уровней энергий ϵ_n (в ед. E_p) пяти ($n = 1 - 5$) низколежащих чётных связанных состояний от числа угловых точек сетки M / The dependence of the energy levels ϵ_n (in units E_p) of five ($n = 1 - 5$) low-lying even bound states on the number of angular-grid points M .

	$ \epsilon_n $				
M	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	$n = 5$
6	0,137671	0,040562	0,019957	0,011255	0,008853
8	0,137747	0,041110	0,019845	0,011702	0,008571
10	0,137748	0,041156	0,019973	0,011825	0,009115
20	0,137748	0,041159	0,019974	0,011859	0,009747
40	0,137748	0,041159	0,019974	0,011859	0,009747

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Заключение

В работе исследованы связанные состояния точечной квантовой частицы в поле двумерного диполя с помощью предложенного численного алгоритма, основанного на методе представления дискретной переменной и методе обратных итераций со сдвигом для определения собственных значений матрицы. Анизотропия потенциала взаимодействия частицы с полем двумерного диполя приводит к связи различных парциальных волн и состояний с различным угловым моментом. Рассчитаны энергии и плотности вероятности состояний с улучшением точности и хорошим согласием с результатами работ [10; 11; 20], для которых отсутствуют оценки ошибок вычисленных значений относительно истинного решения. Выполненные нами расчёты с помощью предложенного алгоритма с известной оценкой точности восполняют этот пробел.

Статья поступила в редакцию 14.09.2020 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Martiyanov K., Makhalov V., Turlapov A. Observation of a two-dimensional Fermi gas of atoms // Physical Review Letters. 2010. Vol. 105. Iss. 3. P. 030404. DOI: 10.1103/PhysRevLett.105.030404.
2. Dipolar collisions of polar molecules in the quantum regime / Ni K. K., Ospelkaus S., Wang D., Quймайннер G., Neyenhuis B., de Miranda M. H. G., Bohn J. L., Ye J., Jin D. S. // Nature. 2010. Vol. 464. Iss. 7293. P. 1324–1328. DOI: 10.1038/nature08953.
3. Near-threshold bound states of the dipole-dipole interaction / Karman T., Frye M. D., Reddel J. D., Hutson J. M. // Physical Review A. 2018. Vol. 98. Iss. 6. P. 062502. DOI: 10.1103/PhysRevA.98.062502.
4. Baranov M. A. Theoretical progress in many-body physics with ultracold dipolar gases // Physical Reports. 2008. Vol. 464. Iss. 3. P. 71–111. DOI: 10.1016/j.physrep.2008.04.007.

5. The physics of dipolar bosonic quantum gases / Lahaye T., Menotti C., Santos L., Lewenstein M., Pfau T. // *Reports on Progress in Physics*. 2009. Vol. 72. Iss. 12. P. 126401. DOI: 10.1088/0034-4885/72/12/126401.
6. Browaeys A., Barredo D., Lahaye T. Experimental investigations of dipole-dipole interactions between a few Rydberg atoms // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2016. Vol. 49. Iss. 15. P. 152001. DOI: 10.1088/0953-4075/49/15/152001.
7. Observation of quantum droplets in a strongly dipolar Bose gas / Ferrier-Barbut I., Kadau H., Schmitt M., Wenzel M., Pfau T. // *Physical Review Letters*. 2016. Vol. 116. P. 215301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.215301.
8. Parameters of LC molecules' movement measured by dielectric spectroscopy in wide temperature range / Chausov D. N., Kurilov A. D., Belyaev V. V., Kumar S. // *Opto-Electronics Review*. 2018. Vol. 26. Iss. 1. P. 44–49. DOI: 10.1016/j.opelre.2017.12.001.
9. Bound states of edge dislocations: The quantum dipole problem in two dimensions / Dasbiswas K., Goswami D., Yoo C. D., Dorsey A. T. // *Physical Review B*. 2010. Vol. 81. Iss. 6. P. 064516. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.064516.
10. Amore P., Fernández F. M. Bound states for the quantum dipole moment in two dimensions // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2012. Vol. 45. Iss. 23. P. 235004. DOI: 10.1088/0953-4075/45/23/235004.
11. Ciftci H., Hall R. L., Saad N. Asymptotic iteration method for eigenvalue problems // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2003. Vol. 36. Iss. 47. P. 11807. DOI: 10.1088/0305-4470/36/47/008.
12. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Наука, 1974. 752 с. (Серия: Теоретическая физика. Т. 3).
13. Бабиков В. В. Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1976. 287 с.
14. Landauer R. Bound States in dislocations // *Physical Review*. 1954. Vol. 94. Iss. 5. P. 1386. DOI: 10.1103/PhysRev.94.1386.2.
15. Emtage P. Binding of electrons, holes, and excitons to dislocations in insulators // *Physical Review*. 1967. Vol. 163. Iss. 3. P. 865. DOI: 10.1103/PhysRev.163.865.
16. Nabutovskii V., Shapiro B. Localized States of Order-Parameter Near a Dislocation // *JETP Letters*. 1977. Vol. 26. Iss. 9. P. 473–475.
17. Слюсарев В. А., Чишко К. А. Электронные локализованные состояния на краевой дислокации в металле // *Физика металлов и металловедение*. 1984. Т. 58. № 5. С. 877–883.
18. Dubrovskii I. A new variational method in the problem of the spectrum of elementary excitations in an edge-dislocation crystal // *Low Temperature Physics*. 1997. Vol. 23. Iss. 12. P. 976–979. DOI: 10.1063/1.593506.
19. Farvacque J.-L., Francois P. Numerical determination of shallow electronic states bound by dislocations in semiconductors // *Physica Status Solidi (b)*. 2001. Vol. 223. Iss. 3. P. 635–648. DOI: 10.1002/1521-3951(200102)223:3<635::AID-PSSB635>3.0.CO;2-K.
20. Handy C., Vranceanu D. Rapidly converging bound state eigenenergies for the two-dimensional quantum dipole // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2013. Vol. 46. Iss. 11. P. 115002. DOI: 10.1088/0953-4075/46/11/115002.
21. Melezhik V. S. New method for solving multidimensional scattering problem // *Journal of Computational Physics*. 1991. Vol. 92. Iss. 1. P. 67–81. DOI: 10.1016/0021-9991(91)90292-S.
22. Koval E. A., Koval O. A., Melezhik V. S. Anisotropic quantum scattering in two dimensions // *Physical Review A*. 2014. Vol. 89. Iss. 5. P. 052710. DOI: 10.1103/PhysRevA.89.052710.
23. Melezhik V. S., Hu C.-Y. Ultracold atom-atom collisions in a nonresonant laser field // *Physical Review Letters*. 2003. Vol. 90. Iss. 8. P. 083202. DOI: 10.1103/PhysRevLett.90.083202.

24. Давыдов А. С. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1973. 704 с.
25. Калиткин Н. Н., Альшин А. В., Альшина Е. А., Рогов Б. В. Вычисления на квазиравномерных сетках. М.: Физматлит, 2005. 224 с.
26. Handbook of Mathematical Functions / eds. Abramowitz M., Stegun A. I. Washington: U.S. National Bureau of Standards, 1965. 470 p.
27. Калиткин Н. Н. Численные методы; 2 изд. СПб.: БХВ-Петербург, 2011. 592 с.
28. Gelfand I. M., Fomin S. V. Calculus of variations / ed. by Silverman R. A. USA: Courier Corporation, 2000. 240 p.

REFERENCES

1. Martiyanov K., Makhalov V., Turlapov A. Observation of a two-dimensional Fermi gas of atoms. In: *Physical Review Letters*, 2010, vol. 105, iss. 3, pp. 030404. DOI: 10.1103/PhysRevLett.105.030404.
2. Ni K. K., Ospelkaus S., Wang D., Quimbyner G., Neyenhuis B., de Miranda M. H. G., Bohn J. L., Ye J., Jin D. S. Dipolar collisions of polar molecules in the quantum regime. In: *Nature*, 2010, vol. 464, iss. 7293, pp. 1324–1328. DOI: 10.1038/nature08953.
3. Karman T., Frye M. D., Reddel J. D., Hutson J. M. Near-threshold bound states of the dipole-dipole interaction. In: *Physical Review A*, 2018, vol. 98, iss. 6, pp. 062502. DOI: 10.1103/PhysRevA.98.062502.
4. Baranov M. A. Theoretical progress in many-body physics with ultracold dipolar gases. In: *Physical Reports*, 2008, vol. 464, iss. 3, pp. 71–111. DOI: 10.1016/j.physrep.2008.04.007.
5. Lahaye T., Menotti C., Santos L., Lewenstein M., Pfau T. The physics of dipolar bosonic quantum gases. In: *Reports on Progress in Physics*, 2009, vol. 72, iss. 12, pp. 126401. DOI: 10.1088/0034-4885/72/12/126401.
6. Browaeys A., Barredo D., Lahaye T. Experimental investigations of dipole-dipole interactions between a few Rydberg atoms. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2016, vol. 49, iss. 15, pp. 152001. DOI: 10.1088/0953-4075/49/15/152001.
7. Ferrier-Barbut I., Kadau H., Schmitt M., Wenzel M., Pfau T. Observation of quantum droplets in a strongly dipolar Bose gas. In: *Physical Review Letters*, 2016, vol. 116, pp. 215301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.215301.
8. Chausov D. N., Kurilov A. D., Belyaev V. V., Kumar S. Parameters of LC molecules' movement measured by dielectric spectroscopy in wide temperature range. In: *Opto-Electronics Review*, 2018, vol. 26, iss. 1, pp. 44–49. DOI: 10.1016/j.opelre.2017.12.001.
9. Dasbiswas K., Goswami D., Yoo C. D., Dorsey A. T. Bound states of edge dislocations: The quantum dipole problem in two dimensions. In: *Physical Review B*, 2010, vol. 81, iss. 6, pp. 064516. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.064516.
10. Amore P., Fernández F. M. Bound states for the quantum dipole moment in two dimensions. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2012, vol. 45, iss. 23, pp. 235004. DOI: 10.1088/0953-4075/45/23/235004.
11. Ciftci H., Hall R. L., Saad N. Asymptotic iteration method for eigenvalue problems. In: *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2003, vol. 36, iss. 47, pp. 11807. DOI: 10.1088/0305-4470/36/47/008.
12. Landau L. D., Lifshits E. M. *Kvantovaya mekhanika (nerelyativistskaya teoriya)* [Quantum mechanics (nonrelativistic theory)]. Moscow, Nauka Publ., 1974. 752 p. (Series: Theoretical Physics. Vol. 3).
13. Babikov V. V. *Metod fazovykh funktsii v kvantovoi mekhanike* [Phase function method in quantum mechanics]. Moscow, Nauka Publ., 1976. 287 p.

14. Landauer R. Bound States in dislocations. In: *Physical Review*, 1954, vol. 94, iss. 5, pp. 1386. DOI: 10.1103/PhysRev.94.1386.2.
15. Emtage P. Binding of electrons, holes, and excitons to dislocations in insulators. In: *Physical Review*, 1967, vol. 163, iss. 3, pp. 865. DOI: 10.1103/PhysRev.163.865.
16. Nabutovskii V., Shapiro B. Localized States of Order-Parameter Near a Dislocation. In: *JETP Letters*, 1977, vol. 26, iss. 9, pp. 473–475.
17. Slyusarev V. A., Chishko K. A. [Electronic localized states at an edge dislocation in a metal]. In: *Fizika metallov i metallovedenie* [The Physics of Metals and Metallography], 1984, vol. 58, no. 5, pp. 877–883.
18. Dubrovskii I. A new variational method in the problem of the spectrum of elementary excitations in an edge-dislocation crystal. In: *Low Temperature Physics*, 1997, vol. 23, iss. 12, pp. 976–979. DOI: 10.1063/1.593506.
19. Farvacque J.-L., Francois P. Numerical determination of shallow electronic states bound by dislocations in semiconductors. In: *Physica Status Solidi (b)*, 2001, vol. 223, iss. 3, pp. 635–648. DOI: 10.1002/1521-3951(200102)223:3<635::AID-PSSB635>3.0.CO;2-K.
20. Handy C., Vranceanu D. Rapidly converging bound state eigenenergies for the two-dimensional quantum dipole. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2013, vol. 46, iss. 11, pp. 115002. DOI: 10.1088/0953-4075/46/11/115002.
21. Melezhik V. S. New method for solving multidimensional scattering problem. In: *Journal of Computational Physics*, 1991, vol. 92, iss. 1, pp. 67–81. DOI: 10.1016/0021-9991(91)90292-S.
22. Koval E. A., Koval O. A., Melezhik V. S. Anisotropic quantum scattering in two dimensions. In: *Physical Review A*, 2014, vol. 89, iss. 5, pp. 052710. DOI: 10.1103/PhysRevA.89.052710.
23. Melezhik V. S., Hu C.-Y. Ultracold atom-atom collisions in a nonresonant laser field. In: *Physical Review Letters*, 2003, vol. 90, iss. 8, pp. 083202. DOI: 10.1103/PhysRevLett.90.083202.
24. Davydov A. S. *Kvantovaya mekhanika. Nerelyativistskaya teoriya* [Quantum mechanics. Nonrelativistic theory]. Moscow, Nauka Publ., 1973. 704 p.
25. Kalitkin H. H., Al'shin A. B., Al'shina E. A., Rogov B. V. *Vychisleniya na kvaziravnomernykh setkakh* [Calculations on quasi-uniform grids]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2005. 224 p.
26. Abramowitz M., Stegun A. I., eds. *Handbook of Mathematical Functions*. Washington, U.S. National Bureau of Standards Publ., 1965. 470 p.
27. Kalitkin N. N. *Chislennyye metody* [Numerical methods]. Saint-Petersburg, BKHV-Peterburg Publ., 2011. 592 p.
28. Gelfand I. M., Fomin S. V.; Silverman R. A. ed. *Calculus of variations*. USA, Courier Corporation Publ., 2000. 240 p.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Коваль Оксана Александровна – младший научный сотрудник Института физики атмосферы им. А. М. Обухова Российской академии наук;
e-mail: kov.oksana20@gmail.com;

Коваль Евгений Александрович – кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник Объединённого института ядерных исследований;
e-mail: e-cov@yandex.ru.

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Oksana A. Koval – junior researcher, A. M. Obukhov Institute of Atmospheric Physics of Russian Academy of Sciences;

e-mail: kov.oksana20@gmail.com;

Eugene A. Koval – Cand. Sci. (Phys.-Math.), junior researcher, Joint Institute for Nuclear Research;

e-mail: e-cov@yandex.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Коваль О. А., Коваль Е. А. Численный анализ энергетических уровней квантовой частицы в поле двумерного диполя // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2020. № 3. С. 23–37.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-23-37

FOR CITATION

Koval O. A., Koval E. A. Numerical analysis of energy levels of quantum particle in field of two-dimensional dipole. In: *Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 2020, no. 3, pp. 23–37.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-23-37