

В. А. Бабенко*, О. В. Нестеров

Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України, Київ, Україна

*Відповідальний автор: pet2@ukr.net

**ПРО БІКВАДРАТИЧНИЙ АНГАРМОНІЧНИЙ ОСЦИЛЯТОР –
ПІДХІД У РАМКАХ РОЗКЛАДУ ПО ОСЦИЛЯТОРНОМУ БАЗИСУ.
I. ДОСЛІДЖЕННЯ ТА РОЗРАХУНОК ЕНЕРГІЙ ОСНОВНОГО І ЗБУДЖЕНИХ СТАНІВ**

Для квантового біквдратичного ангармонічного осцилятора з гамільтоніаном $H = \frac{1}{2}(p^2 + x^2) + \lambda x^4$, який є однією з класичних традиційних моделей квантової механіки та квантової теорії поля, докладно вивчаються і розраховуються його основні фізичні характеристики та властивості на основі застосування розкладу хвильової функції системи по повному набору власних функцій гармонічного осцилятора, тобто по базису власних функцій $\{\varphi_n^{(0)}\}$ незбуреного гамільтоніана $H^{(0)} = \frac{1}{2}(p^2 + x^2)$. Показано дуже хорошу збіжність розрахованих рівнів енергії ангармонічного осцилятора залежно від кількості врахованих у розкладі базисних функцій для широкого спектра зміни параметра λ . Таким чином нами розраховано енергії основного та шести перших збуджених станів системи в дуже широкому інтервалі зміни константи зв'язку осцилятора λ . У цілому використаний метод дає дуже хороший і точний спосіб розрахунку усіх фізичних характеристик системи.

Ключові слова: ангармонічний осцилятор, осциляторний базис, квантова теорія поля.

1. Вступ

Квантовий ангармонічний осцилятор є класичною традиційною широко використовуваною моделлю, що знаходить безліч теоретичних і практичних застосувань у багатьох областях квантової фізики [1 - 10]. Протягом усього періоду розвитку квантовомеханічної теорії ця модель викликала великий інтерес і була предметом численних досліджень, що пов'язано з її багатьма важливими властивостями та характеристиками, а також із можливими застосуваннями для опису значної кількості різних квантових систем та явищ. Дана обставина пов'язана з тим суттєвим фактом, що модель квантового ангармонічного осцилятора є узагальненням та розвитком моделі гармонічного осцилятора і може описувати процеси та їхні характеристики у багатьох квантових системах, де є коливальні ступені свободи. Останні ж, очевидно, існують у безлічі систем. Внаслідок цього практичні застосування даної моделі охоплюють широкі галузі квантової фізики та представляють суттєвий інтерес [1 - 10]. Серед різноманітних та численних застосувань моделі можна назвати, зокрема, опис коливань молекул і атомів у квантовій хімії та атомно-молекулярній фізиці, опис коливань кристалічних решіток у теорії твердого тіла, опис певних дифузійних процесів, а також застосування в теорії лазерів. У силу цілого ряду причин особливий інтерес та важливість модель ангармонічного осцилятора має для квантової теорії поля,

фізики елементарних частинок і теорії атомного ядра [1 - 15]. Як підкреслювалося багатьма авторами, модель ангармонічного осцилятора є однією з найпростіших і, в той же час, досить реалістичних моделей квантової теорії поля, яка має численні характерні квантовопольові особливості та властивості, а тому може бути важливим прикладом та ілюстрацією для вивчення та застосування різних квантовопольових методів, за винятком теорії і методів перенормувань. При цьому очікується, що багато більш реалістичних і багатовимірних квантовомеханічних та квантовопольових моделей повинні мати ті ж самі принципові характерні властивості, що й ангармонічний осцилятор, який таким чином може бути дуже зручною моделлю для вивчення цих властивостей. Зокрема, серед найважливіших проблем для дослідження на прикладі ангармонічного осцилятора можна назвати такі фундаментальні проблеми, як розбіжність рядів теорії збурень та проблема сильного зв'язку, тобто опису властивостей системи в непертурбативній області при великих значеннях константи зв'язку. Зауважимо також, що в теорії атомного ядра деякі ядерні моделі, такі, наприклад, як модель Давидова - Чабана [16], за певних спрощень приводять до гамільтоніанів типу гамільтоніана ангармонічного осцилятора. Останній факт є абсолютно природним у зв'язку із зазначеною вище можливістю моделі ангармонічного осцилятора описувати коливальні ступені свобо-

ди різних квантових систем, зокрема коливання нуклонів у ядрах, коливання поверхні ядер, а також коливальні спектри ядер у рамках деяких моделей атомного ядра [11 - 18].

Таким чином, модель ангармонічного осцилятора є предметом багаточисельних інтенсивних досліджень протягом усього періоду розвитку квантової фізики і, відповідно, її вивченню присвячено багато сотень робіт – див., напр., більш ранні роботи [1, 2, 19 - 32], а також цілий ряд нещодавніх робіт [11 - 15, 33 - 47] та недавно видану окрему достатньо немалу монографію [10], присвячену даній темі. Унаслідок сказаного вище можна відзначити, що ангармонічний осцилятор постійно викликає значний інтерес для дослідження завдяки відносно простому, з одного боку, але в той же час суттєво нетривіальному та показовому характеру даної моделі, з іншого боку, а також завдяки можливим практичним застосуванням. Отже, по суті неможливо представити скільки-небудь повний список робіт, присвячених даній темі. Однак деякі списки публікацій про ангармонічний осцилятор, що включають посилання на низку нових робіт, можна знайти в нещодавній статті [41] та в недавно виданій монографії [10] з цієї теми.

У наших попередніх роботах [48, 49] модель біквдратичного ангармонічного осцилятора вивчалася на основі підсумовування розбіжного ряду теорії збурень Релея - Шредінгера запропонованим покращеним методом Паде-апроксимант з використанням їхнього усереднення, що мало цілий ряд переваг і вперше надало можливість забезпечити в розглянутому підході правильну асимптотику рівнів енергії на нескінченності при зростанні константи зв'язку осцилятора λ . У даній роботі повне, послідовне та всебічне дослідження моделі біквдратичного ангармонічного осцилятора, включаючи систематичний розрахунок усіх його властивостей і характеристик, здійснюється нами на основі застосування розкладу хвильової функції системи по повному набору власних функцій гармонічного осцилятора, тобто по повному базису власних функцій незбуреного гамільтоніана $H(\lambda = 0)$. Даний метод розкладу по осциляторному базису успішно та багаторазово застосовувався нами раніше [50 - 53] в рамках алгебраїчної версії методу резонуючих груп для дослідження та розрахунку властивостей легких атомних ядер. Загалом метод розкладу по осциляторному базису є давнім традиційним підходом до розв'язку багатьох проблем квантової механіки, який неодноразово та успішно використовувався в багатьох теоретичних задачах – див., напр., розлогу монографію [54] по даній темі та чис-

ленні приклади й посилання у ній. Однак послідовне чітке застосування цього підходу до розв'язку задачі про ангармонічний осцилятор, наскільки нам відомо, в літературі відсутнє – хоча підходи з діагоналізації гамільтоніана та варіаційні підходи ряду робіт [44, 55, 56] близькі до цього методу.

2. Деякі властивості біквдратичного ангармонічного осцилятора та розкладу по осциляторному базису функцій – основи теорії і формалізму

Модель одновимірною біквдратичного ангармонічного осцилятора з гамільтоніаном

$$H = H^{(0)} + U = H^{(0)} + \lambda V = \frac{1}{2}(p^2 + x^2) + \lambda x^4 \quad (1)$$

є, як зазначалося, однією з класичних традиційних моделей квантової механіки та квантової теорії поля [1 - 10]. Оператор збурення $U(x) = \lambda V(x) = \lambda x^4$ у цій моделі прямо пропорційний четвертій степені координати x . При цьому на початковому етапі досліджень ми, відповідно до часто прийнятих угод, будемо використовувати систему одиниць, у якій основні параметри осцилятора (його маса, частота та зведена стала Планка) прийняті такими, що дорівнюють одиниці: $m = 1$, $\omega = 1$, $\hbar = 1$. Стационарне рівняння Шредінгера в координатному представленні для хвильової функції системи $\psi(x)$ має в цьому випадку звичайний вигляд

$$H\psi = E\psi, \quad (2)$$

де оператор квадрата імпульсу p^2 може бути записаний через координату x , з урахуванням прийнятих угод, як $p^2 = -\frac{d^2}{dx^2}$. Важливий характеристичний параметр λ , що описує відхилення повного гамільтоніана системи (1) від гамільтоніана звичайного добре відомого гармонічного осцилятора $H^{(0)} = \frac{1}{2}(p^2 + x^2)$, зазвичай носить назву константи зв'язку або параметра ангармонізму. На початковому етапі дослідження природно вважати константу зв'язку λ малим дійсним позитивним параметром. Однак великий фундаментальний і практичний інтерес становить опис та розрахунок характеристик системи також при великих дійсних значеннях параметра λ , тобто в області сильного зв'язку. Для встановлення ж і теоретичного дослідження всіх суттєвих властивостей системи необхідним є вивчення поведінки характеристик системи, таких як її енергія E та

хвильова функція ψ , в усій комплексній площині зміни параметра λ [1, 10, 20]. Відзначимо, що хвильова функція $\psi(x)$, як це видно з (1), (2), залежить також, як від параметрів, від енергії системи E та від константи зв'язку λ – $\psi(x) = \psi_E(\lambda; x)$.

Рівняння (2) у координатному представленні є звичайним диференціальним рівнянням другого порядку відносно хвильової функції системи $\psi(x)$ і має у даному випадку, як відомо, фізичні квадратично інтегровні розв'язки, що називають власними функціями, лише при певних дискретних значеннях енергії системи $E_n = E_n(\lambda)$, які утворюють спектр власних значень $\{E_n(\lambda)\}_{n=0}^{\infty}$. Загальний розв'язок диференціального рівняння другого порядку (2) може бути записаний у вигляді лінійної комбінації $\psi(x) = C_1\psi_1(x) + C_2\psi_2(x)$ двох лінійно незалежних розв'язків $\psi_1(x)$ та $\psi_2(x)$ з деякими сталими C_1 і C_2 , із яких один розв'язок є спадаючим на нескінченності при $x \rightarrow \infty$, а другий розв'язок є зростаючим. Виходячи з фізичних міркувань зростаючий розв'язок (для визначеності, наприклад, $\psi_2(x)$) треба відкинути за рахунок прийняття однієї з констант C_i лінійної комбінації розв'язків такою, що дорівнює нулю (у даному випадку маємо $C_2 = 0$). Залишений довільний множник C_1 теоретично визначається з умови нормування хвильової функції $\psi(x)$ зв'язаного стану системи на одиницю:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^2(x) dx = 1. \quad (3)$$

Водночас хвильова функція $\psi(x)$ обирається дійсною та квадратично інтегрованою згідно з (3), а її асимптотика на нескінченності для обраного спадаючого розв'язку, згідно з диференціальним рівнянням (2), як було показано [20, 57], має

вигляд $\psi(x) \simeq \frac{C}{x} e^{-\frac{\sqrt{2\lambda}}{3}x^3}$. При цьому, в силу

парності гамільтоніана (1) відносно координати x , всі власні фізичні розв'язки рівняння (2) поділяються на парні та непарні.

Звичайний стандартний квантово-механічний підхід для розв'язку вищеописаної задачі про ангармонічний осцилятор полягає в застосуванні теорії збурень по параметру λ [1, 4]. У цьому випадку розклад стандартної теорії збурень

Релея - Шредінгера для хвильової функції $\psi(x)$ і для енергії $E_0(\lambda)$ основного стану даної моделі можуть бути записані у вигляді звичайних степеневих розкладів в околі точки $\lambda = 0$ по степенях константи зв'язку λ :

$$\psi(\lambda; x) = \sum_{n=0}^{\infty} \chi_n(x) \lambda^n = \chi_0(x) + \chi_1(x)\lambda + \chi_2(x)\lambda^2 + \dots, \quad (4)$$

$$E_0(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \lambda^n = A_0 + A_1\lambda + A_2\lambda^2 + \dots, \quad (5)$$

де перший коефіцієнт $A_0 = 1/2$ останнього розкладу дає добре відоме значення основного рівня енергії звичайного гармонічного осцилятора – $E_0(0) = \hbar\omega/2 = 1/2$. Проте Бендером і Ву [1] була строго доведена розбіжність ряду теорії збурень для енергії основного стану $E_0(\lambda)$ ангармонічного осцилятора в усій комплексній площині константи зв'язку λ за винятком початку координат. Водночас для ангармонічного осцилятора, що визначається гамільтоніаном (1), було запропоновано ще цілий ряд якісних аргументів [24, 58, 59], що свідчать на користь розбіжності ряду теорії збурень для даної моделі, з яких найбільш важливим та відомим є так званий «аргумент нестійкості Дайсона» [58]. Останній також іноді називають «феномен Дайсона» або «ефект Дайсона» і його суть полягає в якісній зміні спектра системи при зміні знака параметра λ з позитивного на негативний при будь-якому, скільки завгодно малому, значенні константи λ . А саме, при зміні знака λ з позитивного на негативний, спектр системи «миттєво» стає неперервним і всі дискретні рівні енергії зникають. Таким чином, це демонструє, що точка $\lambda = 0$ є особливою точкою для рівнів енергії як функцій λ , внаслідок чого степеневі ряди Тейлора, тобто ряди теорії збурень, у цій точці є розбіжними. Строго ж математичне доведення цього факту, якісно встановленого Дайсоном [58, 59], було дано Бендером і Ву [1]. Зазначена розбіжність ряду теорії збурень для ангармонічного осцилятора, як і для багатьох інших рядів теорії збурень у квантовій механіці та квантовій теорії поля, не лише представляє значний теоретичний інтерес і є вкрай важливим фактом, але разом із цим дана обставина несе з собою дуже значні теоретичні та практичні труднощі для конкретного застосування і обчислень. Таким чином, у цьому випадку для роботи і практичних обчислень відповідно до теорії збурень необхідним є застосування якихось особливих методів і засобів, наприклад особливих математичних методів підсумовуван-

ня розбіжних рядів теорії збурень. Останнє представляє велику складність, особливо при більш-менш значному зростанні константи зв'язку λ , тобто в області сильного зв'язку.

Проте існує інший підхід до розв'язку задач квантової механіки, також досить поширений і стандартний [50 - 54], який полягає не у розкладі хвильової функції системи в степеневий ряд теорії збурень (4) по константі зв'язку, а в розкладі хвильової функції по добре відомій повній системі власних функцій гармонічного осцилятора. У цьому випадку гамільтоніан нульового наближення $H^{(0)}$ відповідає значенню константи зв'язку $\lambda = 0$

$$H^{(0)} = H(\lambda = 0) = \frac{1}{2}(p^2 + x^2), \quad (6)$$

однак розклад проводиться не по степенях параметра λ , а по власних функціях гамільтоніана (6). Гамільтоніан (6) у даному випадку є гамільтоніаном добре відомого звичайного гармонічного осцилятора, а його власні функції $\{\varphi_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ є розв'язками задачі на власні значення

$$H^{(0)}\varphi_n(x) = E_n^{(0)}\varphi_n(x), \quad (7)$$

де власні значення енергії гармонічного осцилятора визначаються відомим виразом

$$E_n^{(0)} = n + \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8)$$

Взаємно ортогональні та нормовані дійсні власні функції $\varphi_n(x)$ гармонічного осцилятора записуються в явному вигляді як [60, 61]

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^n n!}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (9)$$

де $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$ – класичні поліноми

Ерміта, що є ортогональними з вагою $w(x) = e^{-x^2}$ на дійсній осі $\mathbb{R} = (-\infty, +\infty)$. Власні функції $\varphi_n(x)$ при цьому утворюють повний набір, або базис, у гільбертовому просторі $L^2(\mathbb{R})$ квадратично інтегровних функцій, а умова ортонормованості для них записується у вигляді

$$\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = (\varphi_m, \varphi_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m(x) \varphi_n(x) dx = \delta_{mn}, \quad (10)$$

де δ_{mn} – звичайні символи Кронекера

($\delta_{mn} = 1, m = n; \delta_{mn} = 0, m \neq n$). Відзначимо, що в силу відповідних властивостей поліномів Ерміта при парних значеннях індексу n відповідна осциляторна базисна функція $\varphi_n(x)$ буде парною по x , а при непарних значеннях індексу n – відповідно непарною. Оскільки хвильова функція нашої системи $\psi(x)$ є квадратично інтегрованою (див. (3)) та належить відповідно простору $L^2(\mathbb{R})$, то її можна розкласти в ряд по повному набору базисних функцій гармонічного осцилятора

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x). \quad (11)$$

При цьому дійсні коефіцієнти c_n даного розкладу, що залежать від λ як від параметра – $c_n = c_n(\lambda)$, задовольняють, виходячи з (3) і (10), умові нормування

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n^2 = 1. \quad (12)$$

А повний набір цих коефіцієнтів $\{c_n\}_{n=0}^{\infty} = \{\langle \varphi_n | \psi \rangle\}_{n=0}^{\infty}$ є фактично хвильовою функцією нашої системи в представленні гармонічного осцилятора, або осциляторному представленні, яке також іноді називають «п»-представленням. Останній факт ілюструється виразом цих коефіцієнтів через хвильову функцію ψ :

$$c_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle = \psi(n) = (\varphi_n, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(x) \psi(x) dx. \quad (13)$$

Підставляючи розклад (11) у вихідне рівняння Шредингера (2), отримуємо звичайним чином для коефіцієнтів c_n нескінченну однорідну систему лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\sum_{m=0}^{\infty} H_{mn} c_m = E c_n, \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (14)$$

у якій матричні елементи повного гамільтоніана H даються виразом

$$H_{mn} = \langle \varphi_m | H | \varphi_n \rangle = (\varphi_m, H \varphi_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m(x) H \varphi_n(x) dx = H_{mn}^{(0)} + U_{mn}. \quad (15)$$

При цьому матричні елементи гамільтоніана

нульового наближення $H^{(0)}$ (див. (6)), тобто гамільтоніана гармонічного осцилятора, у власному представленні ϵ , очевидно, діагональними та даються виразом

$$H_{mn}^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \delta_{mn}, \quad (16)$$

а матричні елементи оператора збурення $U = \lambda V$ можуть бути отримані з використанням відомих рекурентних співвідношень для функцій $\varphi_n(x)$ і для елементів V_{mn} їх можна записати у вигляді [62, 63]

$$\begin{aligned} V_{mn} &= \langle x^4 \rangle_{mn} = \langle \varphi_m | x^4 | \varphi_n \rangle = (\varphi_m, x^4 \varphi_n) = (x^2 \varphi_m, x^2 \varphi_n) = \\ &= \frac{1}{4} \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} \delta_{m,n-4} + \\ &+ \frac{1}{2} (2n-1) \sqrt{n(n-1)} \delta_{m,n-2} + \frac{3}{4} (2n^2 + 2n + 1) \delta_{mn} + \\ &+ \frac{1}{2} (2n+3) \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{m,n+2} + \\ &+ \frac{1}{4} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)} \delta_{m,n+4}. \end{aligned} \quad (17)$$

У даному випадку, очевидно, має також місце співвідношення $U_{mn} = \lambda V_{mn}$. З подальших розрахунків і досліджень збіжності буде видно хорошу збіжність власних значень, тобто розрахованих рівнів енергії, що визначаються в результаті розв'язку задачі на власні значення для обрізаної системи рівнянь (14), залежно від кількості врахованих членів розкладу (11) та порядку обрізання системи рівнянь (14).

Для конкретного чисельного розв'язку отриманої нескінченної системи лінійних алгебраїчних рівнянь (14) з наявними в явному вигляді (15) - (17) її матричними елементами необхідно обмежитись у розкладі (11) та відповідно у системі (14) деякою скінченною кількістю членів M . Підставляючи, таким чином, надалі в (14) одержані матричні елементи запишемо систему однорідних лінійних алгебраїчних рівнянь для визначення коефіцієнтів c_n у такому скінченному вигляді:

$$\sum_{n=0}^M \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \delta_{mn} + \lambda V_{mn} \right] c_n = E c_m, \quad m = 0, 1, 2, \dots, M, \quad (18)$$

де матричні елементи V_{mn} даються явною

формулою (17). Систему рівнянь (18) можливо також переписати у формальному матричному вигляді, як це прийнято в матричній квантовій механіці:

$$\mathbf{H}\Psi = E\Psi. \quad (19)$$

Тут $\mathbf{H} = [H_{mn}]$ – це скінченна дійсна симетрична матриця гамільтоніана розмірності $(M+1) \times (M+1)$ з елементами

$$H_{mn} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \delta_{mn} + \lambda V_{mn}, \quad m, n = 0, 1, 2, \dots, M, \quad (20)$$

а Ψ – це скінченний вектор-стовпчик коефіцієнтів c_n

$$\Psi = \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_M \end{bmatrix}, \quad (21)$$

що є фактично хвильовою функцією у матричному представленні. Власні рівні енергії системи E_n при цьому є власними значеннями матриці \mathbf{H} , а їм відповідають власні вектори Ψ_n , які, з врахуванням умови нормування (12), повинні бути обрані векторами одиничної довжини, тобто повинна виконуватись умова

$$\|\Psi\|^2 = c_0^2 + c_1^2 + \dots + c_M^2 = 1. \quad (22)$$

Для остаточних чисельних розрахунків властивостей конкретних фізичних станів ангармонічного осцилятора потрібно також врахувати парність цих станів. Так, для основного стану системи та інших парних станів розклад (11) по базису осциляторних функцій буде містити тільки парні базисні функції – $c_{2j+1} = 0$ для парних станів. Поклавши у (18) $m = 2i$, $n = 2j$ та, з врахуванням парного порядку системи рівнянь, $M = 2N$, остаточно запишемо систему однорідних лінійних алгебраїчних рівнянь для визначення коефіцієнтів c_{2j} у випадку парних станів системи у такому вигляді

$$\sum_{j=0}^N \left[\left(2j + \frac{1}{2} \right) \delta_{ij} + \lambda V_{2i,2j} \right] c_{2j} = E c_{2i}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N. \quad (23)$$

Аналогічна система рівнянь для випадку непарних станів ангармонічного осцилятора ($M = 2N + 1$) має вигляд

$$\sum_{j=0}^N \left[\left(2j + \frac{3}{2} \right) \delta_{ij} + \lambda V_{2i+1, 2j+1} \right] c_{2j+1} = E c_{2j+1},$$

$$i = 0, 1, 2, \dots, N. \quad (24)$$

В останньому випадку розклад (11) по базису осциляторних функцій буде містити лише непарні базисні функції – $c_{2j} = 0$ для непарних станів.

Систему рівнянь (23), так само як і систему рівнянь (24), можна також переписати у формальному матричному вигляді аналогічному (19), де в обох випадках дійсна квадратна симетрична матриця, власні значення та власні вектори якої шукаються, буде мати розмірність $(N + 1) \times (N + 1)$. Слід особливо підкреслити, що задача типу (19) про визначення власних значень і власних векторів деякої квадратної дійсної симетричної матриці скінченного порядку N є класичною дуже добре розробленою в обчислювальній лінійній алгебрі та має багато вельми ефективних чисельних алгоритмів і готових підпрограм її розв'язку, які успішно можуть бути застосовані для конкретних чисельних розрахунків. Еквівалентною їй задачею є, як відомо, задача про діагоналізацію даної матриці. Таким чином, задача про знаходження власних рівнів енергії і відповідних їм власних хвильових функцій біквдратичного ангармонічного осцилятора зводиться у даному підході до задачі про визначення власних значень і власних векторів скінченної дійсної симетричної квадратної матриці гамільтоніана системи в представленні гармонічного осцилятора («п»-представленні) з матричними елементами, які даються формулами (20), (17) з врахуванням також парності відповідних станів. Хвильова функція системи $\psi(x)$ в координатному представленні, з врахуванням

парності, буде даватися розкладом (11) по повному набору базисних функцій гармонічного осцилятора з урахуванням у ньому скінченного числа $N + 1$ членів ($n = \overline{0, N}$).

3. Результати розрахунків та дослідження збіжності для енергії основного рівня біквдратичного ангармонічного осцилятора залежно від числа врахованих базисних осциляторних функцій розкладу

У табл. 1 для різних λ наведено результати розрахунків власних значень енергії $E_0(\lambda)$ основного рівня біквдратичного ангармонічного осцилятора зі стандартною точністю вісім значущих цифр у різних порядках N розкладу хвильової функції системи по осциляторному базису відповідно до вищезрозглянутого методу, тобто як власних значень системи рівнянь (23). При цьому значення константи зв'язку λ було обрано в області слабого зв'язку $\lambda \lesssim 1$. Результати показують у даному випадку дуже хорошу практичну швидкість збіжності та дуже хорошу досягнуто точність розрахунків при використанні у даній області осциляторних розкладів дуже невеликого порядку $N \lesssim 15$. Також при зростанні константи зв'язку λ цілком очевидно сповільнення швидкості збіжності розрахованих значень, що є цілком очікуваним внаслідок того факту, що зі зростанням λ зростає «сила» збурення, яке визначається оператором $U(x) = \lambda x^4$, і відповідно зростає «відхилення» системи від чистого гармонічного осцилятора, внаслідок чого для досягнення хорошого опису та збіжності стає необхідним врахування в розкладі все більшого числа осциляторних базисних функцій.

Таблиця 1. Значення енергії E_0 основного рівня біквдратичного ангармонічного осцилятора, розраховані у різних порядках N розкладу по осциляторному базису при деяких значеннях константи зв'язку λ в області слабого зв'язку $\lambda \lesssim 1$ (число врахованих базисних функцій розкладу дорівнює $N + 1$)

N	$\lambda = 0,01$	$\lambda = 0,05$	$\lambda = 0,1$	$\lambda = 0,25$	$\lambda = 0,3$	$\lambda = 0,5$	$\lambda = 0,7$
1	0,50728471	0,53291674	0,55956491	0,62232307	0,64035424	0,70630142	0,76733622
2	0,50725644	0,53268783	0,55938559	0,62186431	0,63906797	0,69753577	0,74582288
3	0,50725621	0,53264342	0,55916595	0,62129174	0,63853982	0,69745351	0,74566724
4	0,50725620	0,53264285	0,55914665	0,62097863	0,63809736	0,69668553	0,74496964
5	0,50725620	0,53264278	0,55914661	0,62092968	0,63800011	0,69628302	0,74425930
6	0,50725620	0,53264276	0,55914640	0,62092802	0,63799291	0,69618747	0,74397538
7	0,50725620	0,53264275	0,55914633	0,62092772	0,63799287	0,69617775	0,74391212
8	0,50725620	0,53264275	0,55914633	0,62092723	0,63799225	0,69617774	0,74390602
9	0,50725620	0,53264275	0,55914633	0,62092706	0,63799188	0,69617696	0,74390601
10	0,50725620	0,53264275	0,55914633	0,62092703	0,63799179	0,69617622	0,74390508
11	0,50725620	0,53264275	0,55914633	0,62092703	0,63799178	0,69617591	0,74390415
12	0,50725620	0,53264275	0,55914633	0,62092703	0,63799178	0,69617583	0,74390368
13	0,50725620	0,53264275	0,55914633	0,62092703	0,63799178	0,69617582	0,74390353

<i>N</i>	$\lambda = 0,01$	$\lambda = 0,05$	$\lambda = 0,1$	$\lambda = 0,25$	$\lambda = 0,3$	$\lambda = 0,5$	$\lambda = 0,7$
14	0,50725620	0,53264275	0,55914633	0,62092703	0,63799178	0,69617582	0,74390350
15	0,50725620	0,53264275	0,55914633	0,62092703	0,63799178	0,69617582	0,74390350
Ех.	0,50725620	0,53264275	0,55914633	0,62092703	0,63799178	0,69617582	0,74390350

Примітка. В останньому рядку “Ех.” (“Ехаст”) наведено точні значення.

Таблиця 2. Значення енергії E_0 основного рівня біквадратичного ангармонічного осцилятора, розраховані у різних порядках N розкладу по осциляторному базису при деяких значеннях константи зв’язку λ в області проміжного та сильного зв’язку $1 \lesssim \lambda \lesssim 50$

<i>N</i>	$\lambda = 1$	$\lambda = 2$	$\lambda = 5$	$\lambda = 10$	$\lambda = 20$	$\lambda = 25$	$\lambda = 50$
5	0,80469834	0,95435205	1,22955456	1,53280435	2,02335509	2,25295532	3,36402214
10	0,80377399	0,95159076	1,22582543	1,50976951	1,87313929	2,01046262	2,53806547
15	0,80377068	0,95157068	1,22459892	1,50543697	1,86945103	2,00761035	2,51003367
20	0,80377065	0,95156849	1,22459162	1,50498451	1,86608440	2,00297807	2,50597337
25	0,80377065	0,95156848	1,22458721	1,50497950	1,86571365	2,00204840	2,50125468
30	0,80377065	0,95156847	1,22458705	1,50497317	1,86570865	2,00201274	2,49988406
35	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497243	1,86569949	2,00200522	2,49973169
40	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497242	1,86569616	2,00199816	2,49972861
45	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497241	1,86569583	2,00199653	2,49971903
50	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497241	1,86569583	2,00199642	2,49971167
55	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497241	1,86569581	2,00199641	2,49970923
60	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497241	1,86569580	2,00199639	2,49970883
65	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497241	1,86569580	2,00199639	2,49970881
70	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497241	1,86569580	2,00199638	2,49970880
75	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497241	1,86569580	2,00199638	2,49970879
80	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497241	1,86569580	2,00199638	2,49970878
85	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497241	1,86569580	2,00199638	2,49970877
Ех.	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497241	1,86569580	2,00199638	2,49970877

Примітка. В останньому рядку “Ех.” (“Ехаст”) наведено точні значення.

У табл. 2 наведено розраховані запропонованим способом значення енергії $E_0(\lambda)$ основного рівня ангармонічного осцилятора для деяких значень константи зв’язку λ з області проміжного та сильного зв’язку $1 \lesssim \lambda \lesssim 50$. Результати табл. 2 показують подальше передбачуване погіршення збіжності результатів розрахунків по мірі зростання значень константи зв’язку λ . Тим не менш запропонований спосіб розрахунку дає змогу проводити надійні та точні розрахунки у даній достатньо широкій області значень константи зв’язку $\lambda \lesssim 50$ з використанням осциляторних розкладів і відповідно діагоналізації квадратних матриць не дуже високого порядку $N \lesssim 100$. У табл. 3 наведено розраховані запропонованим способом значення енергії $E_0(\lambda)$ основного рівня ангармонічного осцилятора для деяких значень константи зв’язку λ з області надсильного зв’язку $\lambda \gtrsim 100$. Видно, що в даній області погіршення збіжності результатів розрахунків по мірі зростання значень константи зв’язку λ є вже достатньо значним і для досягнення потрібної точності є необхідним враху-

вання декількох сотень базисних осциляторних функцій розкладу, однак у цілому достатнім є вибір порядку розкладу $N \lesssim 700$. Слід при цьому зазначити, що внаслідок вищевказаної прекрасної розробленості методів розв’язку задачі про знаходження власних значень і власних векторів квадратних матриць цілком можливою та реальною при розв’язку даної задачі є робота та оперування з матрицями дуже великої розмірності $N \sim 10000 \div 100000$ – у випадку виникнення такої потреби. У цілому ж для розрахунків зі стандартною точністю вісім значущих цифр після коми в усій практично необхідній області зміни константи зв’язку λ є цілком достатнім вибір порядку розкладу $N \lesssim 1000$.

Однак останнім часом усе більший інтерес і практичну значимість набувають так звані прецизійні розрахунки фізичних характеристик різних моделей ангармонічного осцилятора [39, 44, 45], тобто розрахунки з точністю в декілька десятків значущих цифр. Наприклад, у нещодавній роботі [44] величини, що характеризують ангармонічний осцилятор, точніше близьку до нього модель подвійної ями, розраховувались із точні-

Таблиця 3. Значення енергії E_0 основного рівня біквдратичного ангармонічного осцилятора, розраховані у різних порядках N розкладу по осциляторному базису при деяких значеннях константи зв'язку λ в області надсильного зв'язку $\lambda \gtrsim 100$

N	$\lambda = 100$	$\lambda = 500$	$\lambda = 1000$	$\lambda = 2000$	$\lambda = 5000$	$\lambda = 10000$	$\lambda = 20000$
50	3,13141038	5,32768645	6,71975732	8,46418574	11,68508581	15,80752057	23,37875096
100	3,13138417	5,31991445	6,69428156	8,42901540	11,45877776	14,45908609	18,23396405
150	3,13138416	5,31989443	6,69422256	8,42755115	11,43128071	14,40965840	18,19404951
200	3,13138416	5,31989436	6,69422091	8,42749872	11,43088535	14,39824368	18,14601842
250	3,13138416	5,31989436	6,69422085	8,42749826	11,43081004	14,39810218	18,13759091
300	3,13138416	5,31989436	6,69422085	8,42749818	11,43080463	14,39801275	18,13738649
350	3,13138416	5,31989436	6,69422085	8,42749818	11,43080451	14,39799591	18,13729054
400	3,13138416	5,31989436	6,69422085	8,42749818	11,43080444	14,39799558	18,13723704
450	3,13138416	5,31989436	6,69422085	8,42749818	11,43080444	14,39799541	18,13722954
500	3,13138416	5,31989436	6,69422085	8,42749818	11,43080444	14,39799535	18,13722937
550	3,13138416	5,31989436	6,69422085	8,42749818	11,43080444	14,39799534	18,13722920
600	3,13138416	5,31989436	6,69422085	8,42749818	11,43080444	14,39799534	18,13722909
650	3,13138416	5,31989436	6,69422085	8,42749818	11,43080444	14,39799534	18,13722907
700	3,13138416	5,31989436	6,69422085	8,42749818	11,43080444	14,39799534	18,13722907
Ех.	3,13138416	5,31989436	6,69422085	8,42749818	11,43080444	14,39799534	18,13722907

Примітка. В останньому рядку “Ех.” (“Exact”) наведено точні значення.

стю сорок значущих цифр. Обґрунтування даного інтересу та значимості прецизійних розрахунків можна знайти у вищевказаних роботах. Для здійснення подібних високоточних розрахунків у рамках обговорюваного підходу, очевидно, є необхідним використання осциляторних розкладів і відповідно діагоналізація матриць все більш високого порядку. В силу вищезазначеного зауваження про розробленість методів розв'язку даної задачі, усе це є цілком реалізовуваним.

Таблиця 4. Прецизійний розрахунок значень енергії E_0 основного рівня біквдратичного ангармонічного осцилятора з точністю 20 значущих цифр після коми для деяких значень константи зв'язку λ

λ	N	E_0
0,1	25	0,55914632718351957672
0,25	34	0,62092702982574866086
0,5	46	0,69617582076514592783
1	61	0,80377065123427376935
5	106	1,22458703605919345913
10	134	1,50497240777889109916
25	177	2,00199638413881390772
50	224	2,49970877256879391465

Примітка. N – мінімальний порядок розкладу по осциляторному базису для досягнення даного ступеню точності.

У табл. 4 наведено результати прецизійних розрахунків із точністю двадцять значущих цифр після коми для значень енергії основного стану осцилятора $E_0(\lambda)$ у випадку деяких значень константи λ з області слабкого та проміжного

зв'язку $\lambda \lesssim 50$. З табл. 4 видно, що для досягнення цієї точності необхідно в середньому збільшити розмірність використаного осциляторного базису приблизно в три рази порівняно з використаним раніше. У цілому ж прецизійні розрахунки, очевидно, є цілком здійсненними у рамках розглянутого підходу розкладу по осциляторному базису.

4. Результати розрахунків і дослідження збіжності для енергій низьких збуджених станів біквдратичного ангармонічного осцилятора залежно від числа врахованих базисних осциляторних функцій розкладу

Вивчення та розрахунок енергій збуджених станів ангармонічного осцилятора становлять великий інтерес як з теоретичної точки зору, так і з точки зору практичного застосування і використання для фізичних моделей різних квантових систем. При цьому розрахунки рівнів енергії та відповідних їм хвильових функцій у рамках досліджуваного підходу слід здійснювати для парних станів на основі розв'язку системи рівнянь (23), а для непарних станів на основі розв'язку системи рівнянь (24). Як показують практичні розрахунки, порядок осциляторного базису, необхідний для розрахунку збуджених станів, повинен бути дещо збільшений порівняно з відповідним порядком у випадку основного стану, тобто при одному й тому ж значенні константи зв'язку λ . Однак дане необхідне збільшення порядку не носить кардинального характеру та є цілком помірним, як це можна побачити з результатів розрахунків значень енергії першого

збудженого стану $E_1(\lambda)$ біквдратичного ангармонічного осцилятора для області слабкого зв'язку, наведених у табл. 5. У цьому випадку для досягнення стандартної точності достатнім є врахування в осциляторних розкладах числа членів порядку $N \lesssim 20$ порівняно з числом членів $N \lesssim 15$ у випадку розрахунку енергії основного

стану в даній області зміни константи λ . Таким чином, відносно невелике збільшення порядку використаного осциляторного базису дає можливість надійно розрахувати енергії рівнів цілого ряду найнижчих збуджених станів ангармонічного осцилятора.

Таблиця 5. Значення енергії E_1 першого збудженого рівня біквдратичного ангармонічного осцилятора, розраховані у різних порядках N розкладу по осциляторному базису при деяких значеннях константи зв'язку λ в області слабкого зв'язку $\lambda \lesssim 1$

N	$\lambda = 0,01$	$\lambda = 0,05$	$\lambda = 0,1$	$\lambda = 0,25$	$\lambda = 0,3$	$\lambda = 0,5$	$\lambda = 0,7$
1	1,53575723	1,65382154	1,77095038	2,05529644	2,14170387	2,47367272	2,79624680
2	1,53565077	1,65370349	1,77032414	2,02739820	2,09685759	2,33813960	2,54972832
3	1,53564829	1,65345168	1,76971379	2,02736986	2,09628152	2,32643730	2,51326463
4	1,53564828	1,65343619	1,76951559	2,02652229	2,09552229	2,32643450	2,51171174
5	1,53564828	1,65343618	1,76950320	2,02606063	2,09485084	2,32546932	2,51127708
6	1,53564828	1,65343603	1,76950316	2,02597275	2,09466523	2,32471990	2,51019723
7	1,53564828	1,65343601	1,76950276	2,02596784	2,09464413	2,32446019	2,50952338
8	1,53564828	1,65343601	1,76950265	2,02596760	2,09464402	2,32441214	2,50928581
9	1,53564828	1,65343601	1,76950264	2,02596670	2,09464315	2,32440937	2,50923596
10	1,53564828	1,65343601	1,76950264	2,02596627	2,09464234	2,32440903	2,50923189
11	1,53564828	1,65343601	1,76950264	2,02596617	2,09464204	2,32440774	2,50923174
12	1,53564828	1,65343601	1,76950264	2,02596617	2,09464199	2,32440682	2,50923039
13	1,53564828	1,65343601	1,76950264	2,02596617	2,09464199	2,32440647	2,50922909
14	1,53564828	1,65343601	1,76950264	2,02596617	2,09464199	2,32440637	2,50922841
15	1,53564828	1,65343601	1,76950264	2,02596616	2,09464199	2,32440636	2,50922817
16	1,53564828	1,65343601	1,76950264	2,02596616	2,09464199	2,32440636	2,50922811
17	1,53564828	1,65343601	1,76950264	2,02596616	2,09464199	2,32440636	2,50922811
18	1,53564828	1,65343601	1,76950264	2,02596616	2,09464199	2,32440635	2,50922811
19	1,53564828	1,65343601	1,76950264	2,02596616	2,09464199	2,32440635	2,50922811
20	1,53564828	1,65343601	1,76950264	2,02596616	2,09464199	2,32440635	2,50922810
Ex.	1,53564828	1,65343601	1,76950264	2,02596616	2,09464199	2,32440635	2,50922810

Примітка. В останньому рядку "Ex." ("Exact") наведено точні значення.

Таблиця 6. Значення енергії $E_1 - E_6$ перших шести збуджених рівнів біквдратичного ангармонічного осцилятора при деяких значеннях константи зв'язку λ , розраховані відповідно до розглянутого методу розкладу хвильової функції системи по осциляторному базису

λ	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6
0,01	1,53564828	2,59084580	3,67109494	4,77491312	5,90102667	7,04832688
0,05	1,65343601	2,87397963	4,17633891	5,54929781	6,98496310	8,47739734
0,1	1,76950264	3,13862431	4,62888281	6,22030090	7,89976723	9,65783999
0,25	2,02596616	3,69845032	5,55757714	7,56842287	9,70914788	11,96454362
0,3	2,09464199	3,84478265	5,79657363	7,91175273	10,16648889	12,54425866
0,5	2,32440635	4,32752498	6,57840195	9,02877872	11,64872073	14,41766923
0,7	2,50922810	4,71032810	7,19326528	9,90261070	12,80392971	15,87368362
1	2,73789227	5,17929169	7,94240398	10,96358309	14,20313910	17,63404912
2	3,29286782	6,30388057	9,72732317	13,48127584	17,51413240	21,79095639
5	4,29950173	8,31796075	12,90313811	17,94258561	23,36454045	29,12064937
10	5,32160826	10,34705559	16,09014687	22,40875129	29,21148486	36,43690897
20	6,62845235	12,93046099	20,13941486	28,07599084	36,62427661	45,70645455
25	7,12085350	13,90198143	21,66077524	30,20401603	39,40664348	49,18472735
50	8,91509636	17,43699213	27,19264579	37,93850201	49,51641866	61,82034881
100	11,18725425	21,90689815	34,18252411	47,70720589	62,28123797	77,77077060
500	19,04341673	37,34070210	58,30159947	81,40118710	106,29709170	132,75997584

λ	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6
1000	23,97220606	47,01733873	73,41911384	102,51615713	133,87689122	167,21225819
2000	30,18641645	59,21511396	92,47347155	129,12819984	168,63537539	210,63072012
5000	40,95165848	80,34295631	125,47537195	175,21794811	228,83228750	285,82389581
10000	51,58610333	101,21231580	158,07220754	220,74085668	288,28784144	360,09008661
20000	64,98667570	127,50883864	199,14512348	278,10023732	363,20184322	453,66487479

У табл. 6 наведено розраховані таким чином значення енергій $E_1 - E_6$ перших шести збуджених рівнів біквдратичного ангармонічного осцилятора для широкого інтервалу зміни константи зв'язку λ , що з надлишком покриває весь інтервал для можливих практичних застосувань. Отже, табл. 6 демонструє можливість розглянутого методу гарантовано отримувати значення енергії широкого спектра збуджених станів осцилятора в обширній області зміни параметра λ з використанням базису осциляторних функцій не дуже великої розмірності $N \lesssim 1000$.

5. Висновки

Таким чином, представлений метод вивчення квантового ангармонічного осцилятора на основі розкладу хвильової функції системи по осциляторному базису дає дуже зручну можливість розрахунку всіх фізичних характеристик системи на основі використання розкладів не дуже великого порядку. Водночас слід підкреслити, що даний метод є давнім класичним традиційним підходом до розв'язку квантовомеханічних задач, який, до того ж, є одним з найпростіших у застосуванні. Зокрема, достатньо прозорим і безпосереднім є розрахунок енергій основного та збуджених рівнів ангармонічного осцилятора на основі процедури діагоналізації гамільтоніану

системи в його матричному, або осциляторному, «n»-представленні (20). При цьому, в силу прекрасної розробленості методів розв'язку задачі про визначення власних значень і власних векторів матриць, конкретний числовий розрахунок власних значень енергії системи та коефіцієнтів розкладу c_n , що представляють собою хвильову функцію системи в осциляторному представленні, не несе особливих ускладнень. Швидкість збіжності осциляторних розкладів при конкретних розрахунках виявляється достатньо високою для широкого інтервалу зміни константи зв'язку осцилятора λ – хоча вона і знижується зі зростанням λ . Загалом для розрахунків значень енергії цілого ряду низьколежачих рівнів зі стандартною точністю вісім значущих цифр у всій практично необхідній області зміни константи зв'язку λ є цілком достатнім вибір відносно невеликого порядку осциляторного розкладу $N \lesssim 1000$.

Висловлюємо подяку В. Василевському за корисні обговорення результатів. Дана робота була частково підтримана Програмою фундаментальних досліджень Відділення фізики і астрономії Національної академії наук України (проекти № 0117U000239 і № 0122U000886) та фондом Саймонса.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ / REFERENCES

1. C.M. Bender, T.T. Wu. Anharmonic oscillator. *Phys. Rev.* 184 (1969) 1231.
2. F.T. Hioe, D. MacMillen, E.W. Montroll. Quantum theory of anharmonic oscillators. *Phys. Rep.* 43 (1978) 305.
3. D.I. Kazakov, D.V. Shirkov. Asymptotic series of quantum field theory and their summation. *Fortschr. Phys.* 28 (1980) 465.
4. B. Simon. Large orders and summability of eigenvalue perturbation theory: A mathematical overview. *Int. J. Quant. Chem.* 21 (1982) 3.
5. К. Ициксон, Ж.-Б. Зюбер. *Квантовая теория поля*. Том 2 (Москва: Мир, 1984) 400 с. / C. Itzykson, J.-B. Zuber. *Quantum Field Theory* (New York: McGraw-Hill, 1980) 705 p.
6. G.A. Artega, F.M. Fernández, E.A. Castro. *Large Order Perturbation Theory and Summation Methods in Quantum Mechanics* (Berlin: Springer-Verlag, 1990) 644 p.
7. J.C. Le Guillou, J. Zinn-Justin (Eds.). *Large-Order Behaviour of Perturbation Theory* (Amsterdam: Elsevier Science Publishers, 1990) 594 p.
8. B. Simon. Fifty years of eigenvalue perturbation theory. *Bull. Am. Math. Soc.* 24 (1991) 303.
9. J. Zinn-Justin. *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Oxford: Clarendon Press, 2002) 1054 p.
10. A.V. Turbiner, J.C. del Valle Rosales. *Quantum Anharmonic Oscillator* (Singapore: World Scientific, 2023) 308 p.
11. G. Lévai, J.M. Arias. Search for critical-point nuclei in terms of the sextic oscillator. *Phys. Rev. C* 81 (2010) 044304.
12. A.A. Raduta, P. Buganu. Application of the sextic oscillator with a centrifugal barrier and the spheroidal equation for some X(5) candidate nuclei. *J. Phys. G* 40 (2013) 025108.

13. R. Budaca. Quartic oscillator potential in the γ -rigid regime of the collective geometrical model. *Eur. Phys. J. A* 50 (2014) 87.
14. P. Baganu, R. Budaca. Analytical solution for the Davydov-Chaban Hamiltonian with a sextic potential for $\gamma=30^\circ$. *Phys. Rev. C* 91 (2015) 014306.
15. M.M. Hammad et al. Critical potentials and fluctuations phenomena with quartic, sextic, and octic anharmonic oscillator potentials. *Nucl. Phys. A* 1004 (2020) 122036.
16. A.S. Davydov, A.A. Chaban. Rotation-vibration interaction in non-axial even nuclei. *Nucl. Phys.* 20 (1960) 499.
17. J.P. Davidson. Rotations and vibrations in deformed nuclei. *Rev. Mod. Phys.* 37 (1965) 105.
18. О. Бор, Б. Моттelson. *Структура атомного ядра*. Том 2 (Москва: Мир, 1977) 664 с. / A. Bohr, B.R. Mottelson. *Nuclear Structure*. Vol. 2 (New York: W. A. Benjamin, 1975) 748 p.
19. J.J. Loeffel et al. Pade approximants and the anharmonic oscillator. *Phys. Lett. B* 30 (1969) 656.
20. B. Simon. Coupling constant analyticity for the anharmonic oscillator. *Ann. Phys.* 58 (1970) 76.
21. C.M. Bender, T.T. Wu. Large-order behavior of perturbation theory. *Phys. Rev. Lett.* 27 (1971) 461.
22. C.M. Bender, T.T. Wu. Anharmonic oscillator. II. A study of perturbation theory in large order. *Phys. Rev. D* 7 (1973) 1620.
23. S.N. Biswas et al. Eigenvalues of λx^{2m} anharmonic oscillators. *J. Math. Phys.* 14 (1973) 1190.
24. F.T. Hioe, E.W. Montroll. Quantum theory of anharmonic oscillators. *J. Math. Phys.* 16 (1975) 1945.
25. K. Banerjee. Accurate non-perturbative solution of eigenvalue problems with application to anharmonic oscillator. *Lett. Math. Phys.* 1 (1976) 323.
26. A.V. Turbiner, A.G. Ushveridze. Anharmonic oscillator: Constructing the strong coupling expansions. *J. Math. Phys.* 29 (1988) 2053.
27. F. Vinette, J. Čížek. Upper and lower bounds of the ground state energy of anharmonic oscillators using renormalized inner projection. *J. Math. Phys.* 32 (1991) 3392.
28. E.J. Weniger, J. Čížek, F. Vinette. Very accurate summation for the infinite coupling limit of the perturbation series expansions of anharmonic oscillators. *Phys. Lett. A* 156 (1991) 169.
29. E.J. Weniger, J. Čížek, F. Vinette. The summation of the ordinary and renormalized perturbation series for the ground state energy of the quartic, sextic, and octic anharmonic oscillators using nonlinear sequence transformations. *J. Math. Phys.* 34 (1993) 571.
30. F.M. Fernández, R. Guardiola. Accurate eigenvalues and eigenfunctions for quantum-mechanical anharmonic oscillators. *J. Phys. A* 26 (1993) 7169.
31. E.J. Weniger. A convergent renormalized strong coupling perturbation expansion for the ground state energy of the quartic, sextic, and octic anharmonic oscillator. *Ann. Phys.* 246 (1996) 133.
32. F.M. Fernández, R. Guardiola. The strong coupling expansion for anharmonic oscillators. *J. Phys. A* 30 (1997) 7187.
33. A.V. Turbiner. Anharmonic oscillator and double well potential: Approximating eigenfunctions. *Lett. Math. Phys.* 74 (2005) 169.
34. A. Banerjee. A perturbative treatment of a generalized PT-symmetric quartic anharmonic oscillator. *Mod. Phys. Lett. A* 20 (2005) 3013.
35. E.Z. Liverts, V.B. Mandelzweig, F. Tabakin. Analytic calculation of energies and wave functions of the quartic and pure quartic oscillators. *J. Math. Phys.* 47 (2006) 062109.
36. A.J. Sous. Solution for the eigenenergies of sextic anharmonic oscillator potential. *Mod. Phys. Lett. A* 21 (2006) 1675.
37. H. Ciftci. Anharmonic oscillator energies by the asymptotic iteration method. *Mod. Phys. Lett. A* 23 (2008) 261.
38. H. Ezawa, M. Saito, T. Nakamura. Notes on the Padé approximation for an anharmonic oscillator. *J. Phys. Soc. Japan* 83 (2014) 034003.
39. F.M. Fernández, J. Garcia. Highly accurate calculation of the real and complex eigenvalues of one-dimensional anharmonic oscillators. *Acta Polytech.* 57 (2017) 391.
40. T. Sulejmanpasic, M. Ünsal. Aspects of perturbation theory in quantum mechanics. *Comp. Phys. Com.* 228 (2018) 273.
41. H. Mutuk. Energy levels of one-dimensional anharmonic oscillator via neural networks. *Mod. Phys. Lett. A* 34 (2019) 1950088.
42. J.C. del Valle, A.V. Turbiner. Radial anharmonic oscillator: Perturbation theory, new semiclassical expansion, approximating eigenfunctions. I. *Int. J. Mod. Phys. A* 34 (2019) 1950143.
43. J.C. del Valle, A.V. Turbiner. Radial anharmonic oscillator: Perturbation theory, new semiclassical expansion, approximating eigenfunctions. II. *Int. J. Mod. Phys. A* 35 (2020) 2050005.
44. P. Okun, K. Burke. Uncommonly accurate energies for the general quartic oscillator. *Int. J. Quantum Chem.* 121 (2021) e26554.
45. A.V. Turbiner, J.C. del Valle. Comment on: Uncommonly accurate energies for the general quartic oscillator. *Int. J. Quantum Chem.* 121 (2021) e26766.
46. A.V. Turbiner, J.C. del Valle. Anharmonic oscillator: a solution. *J. Phys. A* 54 (2021) 295204.
47. A.V. Turbiner, J.C. del Valle. From quartic anharmonic oscillator to double well potential. *Acta Polytech.* 62 (2022) 208.
48. В.А. Бабенко, Н.М. Петров. Про квантовий ангармонічний осцилятор та апроксимації Паде. *Ядерна фізика та енергетика* 22 (2021) 127. / V.A. Babenko, N.M. Petrov. On the quantum anharmonic oscillator and Padé approximations. *Nucl. Phys. At. Energy* 22 (2021) 127. (Ukr)
49. V.A. Babenko, N.M. Petrov. On the quartic anharmonic oscillator and the Padé-approximant averaging method. *Mod. Phys. Lett. A* 37 (2022) 2250172.
50. V. Vasilevsky et al. Algebraic model for scattering in three-s-cluster systems. I. *Phys. Rev. C* 63 (2001) 034606.

51. V. Vasilevsky et al. Algebraic model for scattering in three-s-cluster systems. II. *Phys. Rev. C* 63 (2001) 034607.
52. F. Arickx et al. The modified J-matrix approach for cluster descriptions of light nuclei. In: *The J-Matrix Method: Developments and Applications*. A.D. Alhaidari et al. (Eds.) (Berlin: Springer, 2008) p. 269.
53. А.В. Нестеров и др. Трехкластерное описание свойств легких нейтронно- и протонно-избыточных ядер в рамках алгебраической версии метода резонирующих групп. ЭЧАЯ 41 (2010) 1337. / A.V. Nesterov et al. Three-cluster description of properties of light neutron- and proton-rich nuclei in the framework of the algebraic version of the resonating group method. *Phys. Part. Nucl.* 41 (2010) 716.
54. M. Moshinsky, Y.F. Smirnov. *The Harmonic Oscillator in Modern Physics* (Amsterdam: Harwood Academic Publishers, 1996) 414 p.
55. N.W. Bazley, D.W. Fox. Lower bounds for eigenvalues of Schrödinger's equation. *Phys. Rev.* 124 (1961) 483.
56. S.I. Chan, D. Stelman, L.E. Thompson. Quartic oscillator as a basis for energy level calculations of some anharmonic oscillators. *J. Chem. Phys.* 41 (1964) 2828.
57. P.-F. Hsieh, Y. Sibuya. On the asymptotic integration of second order linear ordinary differential equations with polynomial coefficients. *J. Math. Anal. Appl.* 16 (1966) 84.
58. F.J. Dyson. Divergence of perturbation theory in quantum electrodynamics. *Phys. Rev.* 85 (1952) 631.
59. А.В. Турбинер. Задача о спектре в квантовой механике и процедура «нелинеаризации». УФН 144 (1984) 35. / A.V. Turbiner. The eigenvalue spectrum in quantum mechanics and the nonlinearization procedure. *Sov. Phys. Usp.* 27 (1984) 668.
60. А.С. Давыдов. *Квантовая механика* (Москва: Наука, 1973) 704 с. / A.S. Davydov. *Quantum Mechanics* (Oxford: Pergamon Press, 1976) 636 p.
61. І.О. Вакарчук. *Квантова механіка* (Львів: ЛНУ ім. Івана Франка, 2012) 872 с. / I.O. Vakarchuk. *Quantum Mechanics* (Lviv: IFNU of Lviv, 2012) 872 p. (Ukr)
62. R. McWeeny, C.A. Coulson. Quantum mechanics of the anharmonic oscillator. *Math. Proc. Cambridge* 44 (1948) 413.
63. C. Schwartz. A study of some approximation schemes in quantum mechanics. *Ann. Phys.* 32 (1965) 277.

V. A. Babenko*, A. V. Nesterov

Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

*Corresponding author: pet2@ukr.net

THE QUARTIC ANHARMONIC OSCILLATOR – AN OSCILLATOR-BASIS EXPANSION APPROACH. I. ENERGY LEVELS STUDY AND CALCULATION

For the quantum quartic anharmonic oscillator with the Hamiltonian $H = \frac{1}{2}(p^2 + x^2) + \lambda x^4$, which is one of the classic traditional quantum-mechanical and quantum-field-theory models, its main physical characteristics and properties are thoroughly studied and calculated based on the system's wave function expansion in a complete set of the harmonic oscillator eigenfunctions, i.e., in the basis of eigenfunctions $\{\varphi_n^{(0)}\}$ of the unperturbed Hamiltonian $H^{(0)} = \frac{1}{2}(p^2 + x^2)$. Very good convergence of the calculated energy levels of the anharmonic oscillator is demonstrated with respect to the number of basis functions included in the expansion, across a wide range of variation of the parameter λ . Thus, we have computed the energies of the ground and the first six excited states of the system for an exceptionally wide range of the oscillator coupling constant λ . In general, the proposed method provides a very good and accurate way to calculate all system characteristics.

Keywords: anharmonic oscillator, oscillator basis, quantum field theory.

Надійшла / Received 02.05.2024