

В. А. Бабенко\*, О. В. Нестеров

*Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України, Київ, Україна*\*Відповідальний автор: [pet2@ukr.net](mailto:pet2@ukr.net)**ПРО БІКВАДРАТИЧНИЙ АНГАРМОНІЧНИЙ ОСЦИЛЯТОР –  
ПІДХІД У РАМКАХ РОЗКЛАДУ ПО ОСЦИЛЯТОРНОМУ БАЗИСУ.  
II. ДОСЛІДЖЕННЯ ХВИЛЬОВИХ ФУНКЦІЙ І ПРИСКОРЕННЯ ЗБІЖНОСТІ РОЗКЛАДІВ**

Для традиційної фізичної моделі квантового біквдратичного ангармонічного осцилятора з гамільтоніаном  $H = \frac{1}{2}(p^2 + x^2) + \lambda x^4$ , який відіграє значну роль у квантовій теорії поля, фізиці елементарних частинок та ядерній фізиці, докладно вивчаються і розраховуються його фізичні характеристики та властивості. Запропонований нами для дослідження моделі метод розкладу хвильової функції системи по повному набору власних функцій гармонічного осцилятора дає змогу точно аналізувати та розраховувати всі параметри і властивості відповідних квантових систем. Дана модель також широко застосовується для дослідження молекулярних коливань, фононних мод у твердих тілах, нелінійних оптичних явищ тощо. Нами розраховано та побудовано хвильові функції ангармонічного осцилятора для ряду значень константи зв'язку  $\lambda$ . Також запропоновано і докладно вивчено покращений модифікований метод розкладу по узагальненому оптимізуваному осциляторному базису з варійованою частотою цього базису, який дає можливість кардинально прискорити збіжність розкладів у всій області зміни константи зв'язку  $\lambda$  і таким чином значно підвищити ефективність застосованого методу, даючи змогу проводити розрахунки з використанням дуже малого числа базисних функцій  $N \lesssim 10$ . Отже, цей модифікований підхід дає змогу досить просто і ефективно практично повністю розв'язати задачу про біквдратичний ангармонічний осцилятор, забезпечуючи можливість відносно легкого розрахунку при будь-яких значеннях константи зв'язку всіх його фізичних характеристик, включаючи енергії основного і збуджених станів, а також хвильові функції цих станів.

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

**1. Вступ**

Дана робота є прямим і безпосереднім продовженням нашої роботи [1], на яку далі будемо посилатись як на БН1, тобто на першу частину даної роботи. У БН1 для вивчення моделі біквдратичного ангармонічного осцилятора ми запропонували використати метод розкладу хвильової функції системи по повному набору власних функцій гармонічного осцилятора та відповідно на основі цього методу для широкої області зміни константи зв'язку осцилятора  $\lambda$  було розраховано значення енергії основного та перших шести збуджених рівнів ангармонічного осцилятора, використовуючи процедуру діагоналізації гамільтоніана системи в осциляторному "n"-представленні. Подробиці про формулювання задачі про ангармонічний осцилятор, її важливості та актуальності для різних галузей фізики, а також про основи теорії і формалізму розкладу по осциляторному базису див. в БН1. Там же див. подробиці про основні рівняння, формули та позначення. Дана друга частина роботи присвячена подальшому вивченню ряду властивостей біквдратичного ангармонічного осциля-

тора та подальшим розрахункам на основі представленого підходу, а також важливого розвитку методу. У даній частині ми розглядаємо важливе питання побудови та розрахунку хвильових функцій основного і збуджених станів ангармонічного осцилятора на основі запропонованого методу. Також вивчається значуще питання про суттєве покращення опису системи в найважливішій непертурбативній області сильного зв'язку на основі прискорення збіжності розкладів по осциляторному базису.

Для цілісності роботи та зручності читачів викладемо коротко та оглядово у даній вступній частині деякі основні положення формалізму застосованого методу розкладу по осциляторному базису та деякі основні подробиці стосовно моделі квантового ангармонічного осцилятора. Нагадаємо – значний теоретичний інтерес до цієї моделі та численні її практичні застосування пов'язані з тим, що ангармонічний осцилятор є узагальненням та розвитком моделі гармонічного осцилятора і може описувати процеси та їхні характеристики у багатьох квантових системах, де є коливальні ступені свободи. Серед різнома-

нітних фізичних застосувань моделі можна назвати, зокрема, – опис коливань молекул і атомів, тобто такі галузі, як квантова хімія та молекулярна фізика; у теорії твердого тіла – опис коливань та інших властивостей кристалічних ґраток, де ангармонічність взаємодії між атомами у ґратці може відігравати ключову роль для опису властивостей; опис певних дифузійних процесів; квантова оптика, де ангармонічні осцилятори здатні моделювати деякі нелінійні оптичні явища тощо. Особливий інтерес та важливість модель ангармонічного осцилятора має для квантової теорії поля, фізики елементарних частинок і теорії атомного ядра [1 - 13]. Зокрема, 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. У теорії атомного ядра деякі ядерні моделі, такі, наприклад, як модель Давидова - Чабана [11, 14 - 17], за певних спрощень призводять до гамільтоніанів типу гамільтоніана ангармонічного осцилятора. Останній факт є абсолютно природним у зв'язку з можливістю моделі ангармонічного осцилятора описувати коливальні ступені свободи різних квантових систем, зокрема коливання нуклонів у ядрах, коливання поверхні ядер, а також коливальні спектри ядер у рамках деяких моделей атомного ядра [8 - 12, 14 - 19].

У моделі біквадратичного ангармонічного квантового осцилятора з гамільтоніаном

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

важливий характеристичний параметр  $\lambda$ , що описує відхилення повного гамільтоніана (1) системи від гамільтоніана звичайного гармонічного осцилятора  $H^{(0)} = \frac{1}{2}(p^2 + x^2)$ , носить назву константи зв'язку або параметра ангармонізму. Оператор збурення  $U(x) = \lambda V(x) = \lambda x^4$  тут прямо пропорційний четвертій степені координати  $x$ , а основні параметри осцилятора (його масу, частоту та зведену сталу Планка) на початковому етапі дослідження можна прийняти такими, що дорівнюють одиниці:  $m = 1$ ,  $\omega = 1$ ,  $\hbar = 1$ . Стационарне рівняння Шредингера  $H\psi = E\psi$  у координатному представленні для хвильової функції системи  $\psi(x)$  зводиться в цьому випадку до звичайного диференціального рівняння другого порядку відносно хвильової функції  $\psi(x)$  і має

фізичні квадратично інтегровні розв'язки  $\psi_n(x)$ , що називають власними функціями, лише при певних дискретних значеннях енергії системи  $E_n = E_n(\lambda)$ , які утворюють спектр власних значень  $\{E_n(\lambda)\}_{n=0}^{\infty}$ . Один із відомих підходів до розв'язку задач квантової механіки, який ми застосовуємо у даному випадку, – це метод розкладу хвильової функції системи по відомій повній системі  $\{\varphi_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$  власних функцій гармонічного осцилятора, тобто по системі власних функцій гамільтоніана  $H^{(0)} = H(\lambda = 0) = \frac{1}{2}(p^2 + x^2)$ . Ці власні функції  $\{\varphi_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$  є розв'язками задачі на власні значення  $H^{(0)}\varphi_n(x) = E_n^{(0)}\varphi_n(x)$ , де власні значення енергії гармонічного осцилятора визначаються виразом  $E_n^{(0)} = n + \frac{1}{2}$ , а явний вигляд цих функцій дається формулою

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

Тут  $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$  – класичні поліноми Ерміта, а  $\mathcal{N}_n = (\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-1/2}$  – нормувальний множник. Цікаво відзначити, що власні функції гармонічного осцилятора прямим та безпосереднім чином пов'язані з відомими функціями параболічного циліндра  $D_n(x)$  [20 - 23] співвідношенням  $\varphi_n(x) = 2^{n/2} \mathcal{N}_n D_n(\sqrt{2}x) = \tilde{\mathcal{N}}_n D_n(\sqrt{2}x)$ . При цьому функції  $D_n(x)$ , як і осциляторні функції, дають безпосередній та зручний розв'язок рівняння Шредингера для моделі квантового гармонічного осцилятора [23]. Також зазначимо, що існує узагальнення поліномів Ерміта на випадок будь-яких довільних комплексних значень порядку та аргументу – відповідні функції  $H_\nu(z)$  носять назву функцій Ерміта першого роду та при цілих невід'ємних значеннях індексу  $\nu = n$  вони збігаються з поліномами Ерміта. Таким чином, осциляторні функції також можна розглядати та вивчати при довільних комплексних значеннях порядку та аргументу, а відома формула  $D_\nu(z) = 2^{-\nu/2} e^{-z^2/4} H_\nu(z/\sqrt{2})$ , яка вста-

новлює зв'язок між функціями параболічного циліндра та функціями Ерміта, також є справедливою при будь-яких комплексних значеннях порядку  $\nu$  та аргументу  $z$ .

Оскільки хвильова функція нашої системи  $\psi(x)$  є квадратично інтегрованою, а також задовольняє на нескінченності граничним умовам спадання аналогічним відповідним умовам для осциляторних базисних функцій, то її можна розкласти у збіжний ряд по повному набору базисних функцій гармонічного осцилятора:

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x). \quad (3)$$

При цьому дійсні коефіцієнти  $c_n$  даного розкладу, що залежать від  $\lambda$  як від параметра –  $c_n = c_n(\lambda)$ , задовольняють умову нормування  $\sum_{n=0}^{\infty} c_n^2 = 1$ , 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. Обмежуючись у розкладі (3) деякою скінченною кількістю членів  $M$ , для визначення коефіцієнтів  $c_n$  можна отримати [1] таку скінченну систему однорідних лінійних алгебраїчних рівнянь порядку  $M$ :

$$\sum_{n=0}^M \left[ \left( n + \frac{1}{2} \right) \delta_{mn} + \lambda V_{mn} \right] c_n = E c_m, \quad m = 0, 1, 2, \dots, M, \quad (4)$$

де матричні елементи  $V_{mn}$  даються явною формулою (17, БН1). Для остаточних чисельних розрахунків властивостей конкретних фізичних станів потрібно також врахувати парність цих станів. Так, для основного стану системи та інших парних станів розклад (3) по базису осциляторних функцій буде містити тільки парні базисні функції –  $c_{2j+1} = 0$  для парних станів. Поклавши в (4)  $m = 2i$ ,  $n = 2j$  та, з врахуванням парного порядку системи рівнянь,  $M = 2N$ , остаточно можна записати систему однорідних лінійних алгебраїчних рівнянь для визначення коефіцієнтів  $c_{2j}$  у випадку парних станів системи у такому вигляді:

$$\sum_{j=0}^N \left[ \left( 2j + \frac{1}{2} \right) \delta_{ij} + \lambda V_{2i,2j} \right] c_{2j} = E c_{2i}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N. \quad (5)$$

Аналогічна система рівнянь має місце також для випадку непарних станів ангармонічного осцилятора [1]. 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  $\mathbf{H} = [H_{mn}] = \left[ \left( n + \frac{1}{2} \right) \delta_{mn} + \lambda V_{mn} \right]$  гамільтоніана системи в представленні гармонічного осцилятора.

## 2. Побудова та результати розрахунків хвильових функцій біквдратичного ангармонічного осцилятора для деяких значень константи зв'язку залежно від числа врахованих базисних осциляторних функцій розкладу

Хвильова функція системи  $\psi(x)$  у координатному представленні дається в розглянутому підході основним розкладом (3) по осциляторному базису, в якому враховується деяка скінченна кількість членів відповідно до обраного порядку розкладу  $N$ . При цьому зручно враховувати парність аналізованого стану. Так, у випадку основного та інших парних станів системи у розкладі (3) присутні лише парні базисні функції гармонічного осцилятора, тобто відмінні від нуля лише парні коефіцієнти  $c_{2n}$  розкладу –  $\{c_{2n}\}_{n=0}^N$ .

Ці коефіцієнти  $c_{2n}$  визначаються при заданому  $\lambda$  шляхом розв'язання системи однорідних лінійних алгебраїчних рівнянь (5), тобто як координати нормованих на одиницю власних векторів скінченної дійсної симетричної матриці гамільтоніана системи з елементами  $H_{mn} = \left( n + \frac{1}{2} \right) \delta_{mn} + \lambda V_{mn}$ ,

що відповідають певному знайденому власному значенню енергії. У табл. 1 наведено розраховані таким чином значення коефіцієнтів  $c_{2n}$ , тобто хвильову функцію системи в осциляторному представленні, для основного стану осцилятора у випадку двох типових значень константи зв'язку –  $\lambda = 1$  і  $\lambda = 10$ . Порядок розкладу по осциляторному базису був обраний  $N = 89$ , що відповідає врахуванню 90 базисних функцій основного розкладу (3). Результати табл. 1 показують хорошу та швидко збіжність обчислених коефіцієнтів залежно від їхнього порядку. При цьому погіршення швидкості збіжності коефіцієнтів  $c_{2n}$  зі зростанням константи зв'язку  $\lambda$  є досить

Таблиця 1. Значення коефіцієнтів  $c_{2n}$  розкладу хвильової функції основного стану  $\psi_0(\lambda; x)$  біквадратичного ангармонічного осцилятора по осциляторному базису при значеннях константи зв'язку  $\lambda = 1$  і  $\lambda = 10$

$n$	$c_{2n}(\lambda = 1)$	$c_{2n}(\lambda = 10)$	$n$	$c_{2n}(\lambda = 1)$	$c_{2n}(\lambda = 10)$	$n$	$c_{2n}(\lambda = 1)$	$c_{2n}(\lambda = 10)$
0	9,70795971e-1	8,92672723e-1	30	6,25141823e-8	3,26660738e-5	60	-1,86029470e-12	1,16871292e-7
1	-2,33973361e-1	-3,87986676e-1	31	-3,36708449e-8	-2,10863726e-5	61	9,88900325e-13	-9,7738862e-8
2	5,15493461e-2	1,98613310e-1	32	1,41147446e-8	1,22051588e-5	62	-3,89677284e-13	7,95035184e-8
3	-1,31953282e-3	-1,01240820e-1	33	-2,40619550e-9	-5,65710650e-6	63	1,65814880e-14	-6,28186321e-8
4	-8,60072019e-3	4,81900474e-2	34	-3,55320702e-9	1,04600755e-6	64	1,85720723e-13	4,80517299e-8
5	7,39640799e-3	-1,93134328e-2	35	5,76787390e-9	2,01386153e-6	65	-2,69753981e-13	-3,53567158e-8
6	-4,37611843e-3	4,15396693e-3	36	-5,83318261e-9	-3,87366749e-6	66	2,79353530e-13	2,47339511e-8
7	2,04084356e-3	3,18597066e-3	37	4,87035858e-9	4,83802404e-6	67	-2,47807756e-13	-1,60789691e-8
8	-6,90933604e-4	-6,14922182e-3	38	-3,58335063e-9	-5,16109176e-6	68	1,98336148e-13	9,22096259e-9
9	5,84170495e-5	6,76477185e-3	39	2,35943870e-9	5,04782085e-6	69	-1,45711327e-13	-3,95235488e-9
10	1,63910628e-4	-6,21966082e-3	40	-1,37125048e-9	-4,65820470e-6	70	9,82535981e-14	5,08065998e-11
11	-1,91945399e-4	5,19268768e-3	41	6,61230664e-10	4,11305389e-6	71	-5,97484225e-14	2,70503277e-9
12	1,48782636e-4	-4,05581180e-3	42	-2,03263437e-10	-3,50028777e-6	72	3,10645115e-14	-4,52482301e-9
13	-9,36092580e-5	2,99780934e-3	43	-5,68849693e-11	2,88110292e-6	73	-1,13976756e-14	5,59980586e-9
14	4,90747770e-5	-2,10062357e-3	44	1,77842259e-10	-2,29563951e-6	74	-8,48101535e-16	-6,09912248e-9
15	-1,99459110e-5	1,38633915e-3	45	-2,10698686e-10	1,76795021e-6	75	7,48776125e-15	6,16839162e-9
16	3,84298932e-6	-8,45731343e-4	46	1,94589987e-10	-1,31020029e-6	76	-1,02207808e-14	-5,92990269e-9
17	3,40159639e-6	4,55235540e-4	47	-1,56546402e-10	9,26107603e-7	77	1,04671090e-14	5,48390459e-9
18	-5,50975958e-6	-1,86675466e-4	48	1,13383082e-10	-6,13679173e-7	78	-9,31507219e-15	-4,91058251e-9
19	5,11609860e-6	1,25168912e-5	49	-7,42527288e-11	3,67326262e-7	79	7,53574920e-15	4,27241069e-9
20	-3,81723065e-6	9,15879102e-5	50	4,31026576e-11	-1,79450077e-7	80	-5,63104283e-15	-3,61664994e-9
21	2,44320933e-6	-1,45844751e-4	51	-2,06930189e-11	4,15901346e-8	81	3,89365101e-15	2,97782400e-9
22	-1,33960606e-6	1,66248124e-4	52	6,08330663e-12	5,47786577e-8	82	-2,46576590e-15	-2,38006211e-9
23	5,85690505e-7	-1,64964449e-4	53	2,37262592e-12	-1,17723545e-7	83	1,38959352e-15	1,83923593e-9
24	-1,38111028e-7	1,50908098e-4	54	-6,42613977e-12	1,54540208e-7	84	-6,46998338e-16	-1,36485050e-9
25	-8,61375534e-8	-1,30360810e-4	55	7,61941642e-12	-1,71592877e-7	85	1,88167674e-16	9,61671826e-10
26	1,68419863e-7	1,07554362e-4	56	-7,16001161e-12	1,74263724e-7	86	4,94043268e-17	-6,3109027e-10
27	-1,72340268e-7	-8,51788047e-5	57	5,90792130e-12	-1,66976323e-7	87	-1,29706521e-16	3,72229392e-10
28	1,40973391e-7	6,48036387e-5	58	-4,42052222e-12	1,53266044e-7	88	1,12752092e-16	-1,82817187e-10
29	-9,99911783e-8	-4,72133771e-5	59	3,01971648e-12	-1,35877067e-7	89	-5,29952660e-17	5,98398862e-11

Примітка. Порядок розкладу по осциляторному базису обрано таким, що дорівнює  $N = 89$  (врахування 90 базисних функцій).

помірним, так що при використаних 90 базисних функціях розкладу досягнута точність розрахунку коефіцієнтів  $c_{2n}$ , тобто хвильової функції системи в осциляторному представленні, становить  $\sim 10^{-16}$  для випадку  $\lambda = 1$  і  $\sim 10^{-10}$  для випадку  $\lambda = 10$ . Фактично табл. 1 дає табульовану хвильову функцію системи для цих двох значень константи зв'язку, а будь-яке конкретне значення хвильової функції  $\psi_0(\lambda; x)$  у координатному представленні при заданому значенні координати  $x$  легко може бути отримане з основного розкладу (3). Проте при цьому слід врахувати, що в табл. 1 наведено лише вісім значущих цифр після коми для розрахованих коефіцієнтів  $c_{2n}$ . Більш точний розрахунок надається врахуванням відповідного більшого числа значущих цифр при обчисленні координат власних нормованих векторів гамільтоніана системи в осциляторному представленні.

На рис. 1 наведено розраховані таким чином хвильові функції  $\psi_0(\lambda; x)$  основного стану ангармонічного осцилятора для випадків значень константи зв'язку  $\lambda = 1$ ,  $\lambda = 10$  і  $\lambda = 100$ . Також для порівняння на рис. 1 наведено хвильову функцію основного стану гармонічного осцилятора  $\phi_0(x)$ . Очевидним і зрозумілим є все більш високий, вузький та різкий характер поведінки хвильової функції  $\psi_0(\lambda; x)$  при зростанні  $\lambda$ , оскільки все більш вузьким і різким є характер зростання потенціалу збурення  $U(x) = \lambda x^4$  при зростанні  $\lambda$ . Необхідно також відзначити очевидне з рис. 1 дуже швидке спадання хвильової функції системи при зростанні  $x$ , яке стає все більш швидким і різким зі зростанням константи  $\lambda$ . Останнє легко бачити як з характеру поведінки потенціалу збурення при зростанні  $\lambda$ , так і з характеру асимптотики хвильової функції ангармонічного осцилятора.

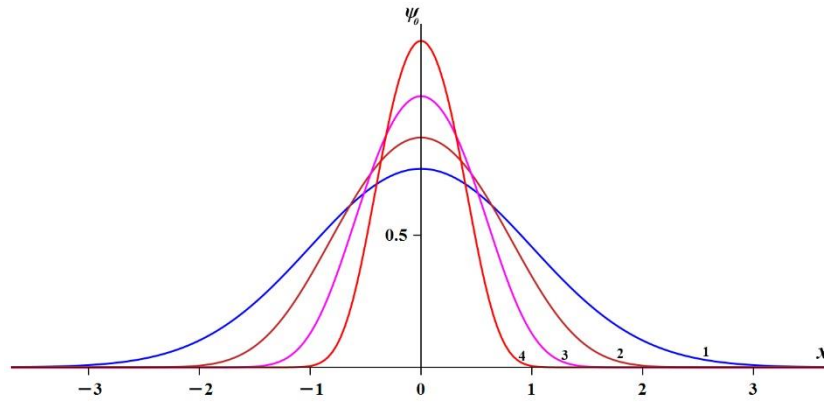


Рис. 1. Хвильова функція основного стану гармонічного осцилятора  $\varphi_0(x)$  (синя крива 1), а також хвильові функції основного стану біквдратичного ангармонічного осцилятора  $\psi_0(\lambda = 1; x)$  при значенні константи зв'язку  $\lambda = 1$  (коричнева крива 2),  $\psi_0(\lambda = 10; x)$  при значенні константи зв'язку  $\lambda = 10$  (бузкова крива 3) і  $\psi_0(\lambda = 100; x)$  при значенні константи зв'язку  $\lambda = 100$  (червона крива 4). Останні три хвильові функції розраховано та побудовано згідно з розкладом по осциляторному базису з використанням розрахованих значень коефіцієнтів розкладу  $c_{2n}$ . (Див. кольоровий рисунок на сайті журналу.)

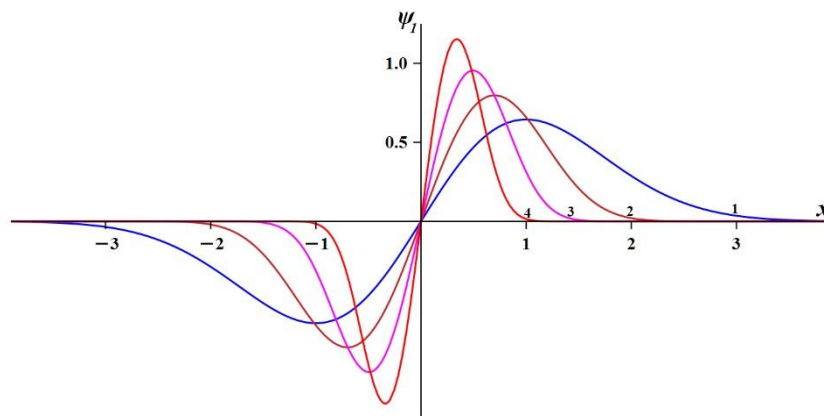


Рис. 2. Хвильова функція першого збудженого стану гармонічного осцилятора  $\varphi_1(x)$  (синя крива 1), а також хвильові функції першого збудженого стану біквдратичного ангармонічного осцилятора  $\psi_1(\lambda = 1; x)$  при значенні константи зв'язку  $\lambda = 1$  (коричнева крива 2),  $\psi_1(\lambda = 10; x)$  при значенні константи зв'язку  $\lambda = 10$  (бузкова крива 3) і  $\psi_1(\lambda = 100; x)$  при значенні константи зв'язку  $\lambda = 100$  (червона крива 4). Останні три хвильові функції розраховано та побудовано згідно з розкладом по осциляторному базису з використанням розрахованих значень коефіцієнтів розкладу  $c_{2n+1}$ . (Див. кольоровий рисунок на сайті журналу.)

На рис. 2 наведено розраховані аналогічним чином хвильові функції  $\psi_1(\lambda; x)$  першого збудженого стану ангармонічного осцилятора для випадків значень константи зв'язку  $\lambda = 1$ ,  $\lambda = 10$  і  $\lambda = 100$ . Також для порівняння на рис. 2 наведено хвильову функцію першого збудженого стану гармонічного осцилятора  $\varphi_1(x)$ . У цілому характер поведінки хвильових функцій першого збудженого стану при зростанні значень константи зв'язку  $\lambda$  залишається тим же, як і очікувалось. Отже, загалом представлений метод дає дуже зручний і точний спосіб розрахунку хвильових функцій станів системи, як і рівней її енергії, для будь-якого значення константи зв'язку  $\lambda$ . Однак очевидно, що зі зростанням  $\lambda$ , особливо в області сильного зв'язку, природним чином погіршується збіжність розкладів і для досягнення

певної заданої точності розрахунку стає необхідним врахування все більшої кількості базисних функцій розкладу. Однак у наступному розділі ми розглянемо спосіб дуже суттєвого покращення ситуації зі збіжністю розкладів по базису осциляторних функцій.

### 3. Покращення опису системи в області сильного зв'язку та прискорення збіжності розкладів за рахунок покращення нульового наближення і варіювання частоти власних функцій базису гармонічного осцилятора

Описані розрахунки власних значень енергії та відповідних їм власних функцій ангармонічного осцилятора згідно з вищевикладеним методом показують погіршення збіжності розкладів по осциляторному базису зі зростанням константи зв'язку  $\lambda$ . Останній факт природним чином

пояснюється все більш зростаючою «силою» потенціалу збурення  $U(x) = \lambda x^4$  зі зростанням  $\lambda$  і відповідно все більшим його відхиленням від потенціалу гармонічного осцилятора  $\frac{1}{2}x^2$ , що входить до гамільтоніана нульового наближення  $H^{(0)} = \frac{1}{2}(p^2 + x^2)$ , по власних функціях якого відбувається розклад. З одного боку це погіршення збіжності не є настільки суттєвою проблемою, враховуючи можливості сучасних комп'ютерів, а також розробленість обчислювальних методів діагоналізації матриць і можливості оперувати з матрицями великої розмірності. Однак, з іншого боку, вкрай бажаною та зручною була б можливість прискорити збіжність використовуваних розкладів, особливо в області сильного зв'язку, як з метою більш швидкого та надійного отримання розрахункових результатів, так і з метою більш наочної і зрозумілої інтерпретації їх. Тобто представлення наближених розв'язків і результатів обчислень за допомогою невеликої кількості ( $N \lesssim 10$ ) базисних функцій розкладу замість сотень і тисяч базисних функцій є дуже корисним і наочним, даючи фактично результати у скінченному аналітичному вигляді, що завжди є дуже продуктивним і цінним. До того ж більш швидка збіжність використовуваних розкладів може мати суттєве значення при прецизійних розрахунках з великою кількістю значущих цифр. Також прискорена збіжність може виявитися надзвичайно важливою та зручною при використанні розкладу по осциляторному базису для розв'язання інших, складніших з обчислювальної точки зору, задач, – наприклад, при розрахунках характеристик більш складних осциляторних моделей з більш сингулярними потенціалами збурення або при узагальненнях для розрахунку багатовимірних моделей. Усе це робить розробку методів прискорення збіжності по осциляторному базису дуже актуальною та бажаною. Отже, у світлі вищезазначеного, вкрай важливою та цінною є можливість того, що представлений нами метод розкладу по осциляторному базису надає такий виключно зручний і дієвий спосіб суттєвого прискорення збіжності розкладів і значного підвищення ефективності методу за рахунок більш ефективного способу вибору частоти використаного для розкладу осциляторного базису. Зауважимо, що методи перенормування та/або варіювання частоти осцилятора з метою отримання збіжних розкладів і покращення ефективності сходять історично ще до розгляду осцилятора в класичній механіці, починаючи з робіт А. Ліндштедта і А. Пуанкаре – див. у цьому зв'язку метод Ліндштедта - Пуан-

каре [24, 25]. Також можна вказати на деякі роботи, що розглядали питання покращення збіжності розкладів по осциляторному базису на прикладах деяких простих алгебраїчних моделей варіюванням осциляторної довжини, яка простим чином пов'язана з частотою – див., напр., [26, 27]. Таким чином, запропонований і використовуваний нами далі метод варіювання частоти осциляторного базису є достатньо природним і обґрунтованим для застосування, приводячи у підсумку до значного прискорення збіжності осциляторних розкладів і загалом до дуже хороших результатів.

Отже, для подальшого розгляду, ми будемо досліджувати надалі гамільтоніан біквдратичного ангармонічного осцилятора з деякою довільною частотою  $\omega$ :

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 x^2) + \lambda x^4. \quad (6)$$

Будемо при цьому використовувати систему одиниць, у якій маса осцилятора і зведена стала Планка, як і раніше, прийняті такими, що дорівнюють одиниці:  $m = 1$ ,  $\hbar = 1$ . Частота осцилятора  $\omega$  у нас в даному випадку – це єдиний незалежний розмірний параметр, отже розмірність усіх інших фізичних характеристик осцилятора виражається через розмірність частоти відповідно до таких співвідношень:  $[H] = [E] = [\omega]$ ,  $[p] = [\omega]^{1/2}$ ,  $[x] = [\omega]^{-1/2}$ ,  $[\lambda] = [\omega]^3$ . Загальновідомо, що частота, як правило, вимірюється в Герцах –  $1 \text{ Гц} = 1 \text{ с}^{-1}$ . Однак оскільки в даному випадку ( $\hbar = 1$ ) у нас розмірність частоти збігається з розмірністю енергії, то в різних областях квантових застосувань частота та енергія можуть вимірюватись у відповідних, прийнятих для даної області, одиницях. Наприклад, у ядерній фізиці енергія в більшості випадків вимірюється в мегаелектронвольтах (MeV), а в атомній фізиці в електронвольтах (eV) або в енергіях Хартрі  $E_h$  ( $1E_h = 27,2113845 \text{ eV}$ ). Надалі одиниці вимірювання відповідних величин будемо опускати, оскільки в кінцевому підсумку нашою метою, як і раніше, буде розрахунок характеристик гамільтоніана (1) з одиничною частотою, тобто в кінцевому підсумку ми будемо розраховувати всі величини для основного випадку  $\omega = 1$  і переходити в решті-решт до цього випадку. При малих значеннях константи зв'язку  $\lambda$ , з яких зазвичай починається розгляд, було цілком природним, як було розглянуто раніше, прийняти в якості гамільтоніана нульового наближення гамільтоніан, що відповідає нульовому значенню константи зв'язку  $\lambda = 0$ :

$$H^{(0)} = H(\lambda = 0) = \frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 x^2). \quad (7)$$

Відповідно як базис для розкладу хвильової функції системи при цьому використовувався повний набір власних функцій гамільтоніана  $H^{(0)}$ . Однак при великих значеннях параметра  $\lambda$  нульове наближення (7) стає все гіршим і все менш адекватним, що і відображається відповідно на погіршенні збіжності розрахункових величин. Проте існує можливість суттєвим чином виправити ситуацію та кардинально покращити нульове наближення в нашій задачі за рахунок більш ефективного і раціонального вибору частоти гамільтоніана нульового наближення. А саме, розглянемо як гамільтоніан нульового наближення, по власних функціях якого буде відбуватися розклад, деякий гамільтоніан гармонічного осцилятора  $\mathcal{H}^{(0)}$ , що відповідає деякій ефективній частоті  $\omega_0$ , яка в загальному випадку відмінна від вищезазначеної  $\omega$ , і буде розглядатися нами далі як деякий вільний варійований підгінний параметр. Записується цей гамільтоніан нульового наближення у вигляді

$$\mathcal{H}^{(0)} = \mathcal{H}^{(0)}(\omega_0) = \frac{1}{2}(p^2 + \omega_0^2 x^2) \quad (8)$$

і за рахунок ефективного та розумного вибору частоти  $\omega_0$  (її збільшення) його можна зробити набагато кращим і оптимальним нульовим наближенням, суттєво більш близьким до початкового повного гамільтоніана (6), ніж гамільтоніан  $H^{(0)}$ . Наш повний гамільтоніан системи  $H$  тепер можна записати у вигляді

$$H = \mathcal{H}^{(0)} + W, \quad (9)$$

де оператор збурення  $W$  дається виразом:

$$W = \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{2} x^2 + \lambda x^4. \quad (10)$$

З виразів (8) - (10) стає зрозумілою користь вибору гамільтоніана нульового наближення у вигляді (8) з відповідним чином обраною ефективною частотою  $\omega_0$ . А саме, при зростанні параметра  $\lambda$ , особливо при великих фіксованих значеннях  $\lambda$  з області сильного зв'язку, ми можемо завдяки збільшенню параметра  $\omega_0$  зробити потенціал гамільтоніана нульового наближення  $\frac{1}{2}\omega_0^2 x^2$  набагато більш «близьким» до потенціалу збурення  $U(x) = \lambda x^4$  і, відповідно, суттєво покращити якість цього нульового наближення.

По-іншому ж це означає, що при фіксованому  $\lambda$  є можливим досить помітно «ефективно зменшити» потенціал збурення  $W$  завдяки збільшенню параметра  $\omega_0$ , оскільки в (10) відповідний член входить з від'ємним знаком. Вищесказане ілюструється рис. 3, на якому показано потенціал гармонічного осцилятора у випадку звичайного нульового наближення ( $\omega_0 = 1$ ) та у випадку покращеного нульового наближення ( $\omega_0 = 16$ ) порівняно з потенціалом збурення  $U(x) = \lambda x^4$  при  $\lambda = 100$ , обраним як приклад. При цьому частотний параметр покращеного нульового наближення  $\omega_0 = 16$  обрано згідно з нашими подальшими розрахунками (див. далі табл. 3) як найбільш оптимальний для розрахунків з потенціалом збурення  $U(x) = 100x^4$ . Отже, більш ефективний вибір частотного параметра  $\omega_0$  нульового наближення (8), а саме – його збільшення для випадку більших фіксованих значень константи зв'язку  $\lambda$ , здатен дуже суттєво покращити якість і адекватність нульового наближення (8). Насправді це можна також бачити з рис. 1 і 2, які фактично показують на прикладі відповідних хвильових функцій поетапне послідовне погіршення якості звичайного нульового наближення зі зростанням константи зв'язку  $\lambda$ , що демонструється все більшою відмінністю при зростанні  $\lambda$  істинної хвильової функції системи від осциляторної хвильової функції звичайного нульового наближення. Проте ж збільшуючи частоту  $\omega_0$  базисних хвильових функцій гамільтоніана (8) ми будемо одночасно робити їх усе більш сконцентрованими поблизу нуля і більш різкими, а відповідно і більш близькими до істинної хвильової функції системи. Разом з цим очевидно, що покращення нульового наближення (8) зі зростанням параметра  $\omega_0$  не може тривати безмежно, а має свою границю, після якої якість наближення (8) почне погіршуватися у зв'язку з усе більшим відхиленням потенціалу та основної хвильової функції нульового наближення від істинних вже в протилежному напрямку. Іншими словами, обов'язково існуватиме деяке оптимальне значення параметра  $\omega_0$ , при якому опис системи і збіжність відповідних розкладів будуть найкращими. Отже, загалом вибір найбільш оптимального нульового наближення (8) з найбільш оптимальним значенням частоти  $\omega_0$  має в своїй основі прозоре та ясне математичне і фізичне обґрунтування як з точки зору «ефективного зменшення» потенціалу збурення  $W$  у даному підході, так і з точки зору забезпе-

чення все більшої близькості хвильової функції нульового наближення до істинної хвильової функції та відповідно більшої адекватності ну-

льового наближення. Зазначимо, що попередній розгляд в БНІ очевидним чином відповідав граничному частковому випадку  $\omega_0 = \omega = 1$ .

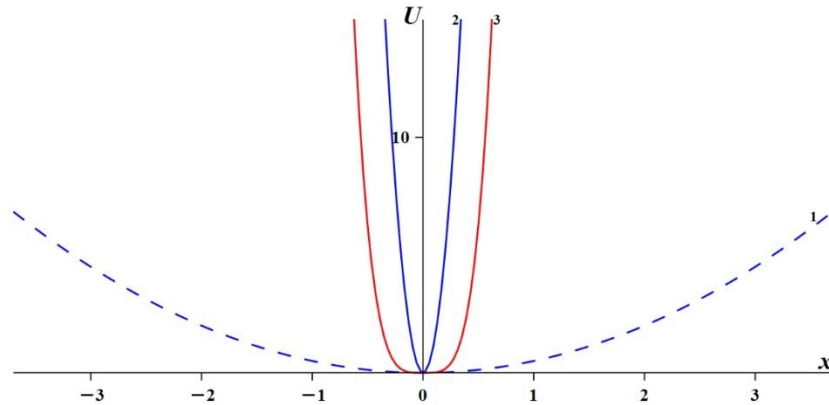


Рис. 3. Потенціал гармонічного осцилятора  $\frac{1}{2}\omega_0^2x^2$  при значенні частоти  $\omega_0 = 1$ , що відповідає звичайному нульовому наближенню (штрихована синя крива 1) та при значенні частоти  $\omega_0 = 16$ , що відповідає покращеному нульовому наближенню (суцільна синя крива 2), а також потенціал збурення  $U(x) = \lambda x^4$  при значенні константи зв'язку  $\lambda = 100$  (червона крива 3). (Див. кольоровий рисунок на сайті журналу.)

Для конкретної реалізації і розвитку вищевказаного плану з покращення опису системи та прискорення збіжності розкладів по осциляторному базису скористаємося далі відомим виглядом власних функцій  $\varphi_n(\omega_0; x)$  гамільтоніана загального гармонічного осцилятора  $\mathcal{H}^{(0)}(\omega_0)$  з деякою довільною частотою  $\omega_0$ :

$$\varphi_n(\omega_0; x) = \frac{\sqrt[4]{\omega_0/\pi}}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\omega_0 x^2/2} H_n(\sqrt{\omega_0} x), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (11)$$

де  $H_n(\xi)$  – вищезгадані поліноми Ерміта. Власні функції  $\{\varphi_n(\omega_0; x)\}_{n=0}^{\infty}$  гамільтоніана  $\mathcal{H}^{(0)}(\omega_0)$  відповідають його власним значенням енергії

$$\mathcal{E}_n^{(0)} = \omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (12)$$

і утворюють повний набір, або базис, у просторі  $L^2(\mathbb{R})$  квадратично інтегровних функцій. Щоб дещо підкреслити відмінність від попереднього розгляду і з метою більш точної та чіткої ідентифікації, будемо далі називати базис  $\{\varphi_n(\omega_0; x)\}_{n=0}^{\infty}$  гамільтоніана  $\mathcal{H}^{(0)}(\omega_0)$  узагальненим осциляторним базисом або оптимізуючим базисом. Для переходу при розгляді гамільтоніана  $\mathcal{H}^{(0)}(\omega_0)$  та його власних функцій  $\varphi_n(\omega_0; x)$  до зручніших безрозмірних змінних зазвичай

вводять у розгляд деякий додатковий характеристичний параметр розмірності довжини, який звичайно позначається  $x_0$  або  $b_0$  і має назву осциляторної довжини. У нашому випадку ( $m = 1, \hbar = 1$ ) осциляторна довжина  $x_0$  визначається співвідношенням

$$x_0 = \frac{1}{\sqrt{\omega_0}}, \quad (13)$$

а в загальному випадку вона визначається відомим співвідношенням  $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$ . Тоді безрозмірна координата  $\xi$  визначається як

$$\xi = \frac{x}{x_0} = \sqrt{\omega_0} x, \quad (14)$$

а власні функції  $\varphi_n(\omega_0; x)$  можуть бути записані у вигляді

$$\varphi_n(\omega_0; x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \varphi_n(\xi), \quad (15)$$

де  $\varphi_n(\xi)$  даються виразом (2), у якому незалежна змінна розуміється безрозмірною. Відзначимо, що у термінах осциляторної довжини  $x_0$  можлива додаткова фізична інтерпретація, або обґрунтування, покращення ефективності нульового наближення (8) при відповідному виборі параметра  $\omega_0$ , а саме – при зменшенні характерної осциляторної довжини  $x_0$ , що відповідає збільшенню частоти  $\omega_0$ , хвильова функція ну-



льового наближення стає все більш «сконцентрованою» навколо нуля і її поведінка стає все більш близькою до поведінки істинної хвильової функції системи при великих значеннях константи зв'язку  $\lambda$ , тобто у випадку більш швидкого та різкого зростання потенціалу збурення  $U(x) = \lambda x^4$ .

Квадратично інтегровну хвильову функцію нашої системи  $\psi(x)$  можна розкласти, аналогічно розгляду у БН1, у ряд по повному набору узагальнених базисних функцій (11) гамільтоніана  $\mathcal{H}^{(0)}(\omega_0)$  узагальненого гармонічного осцилятора

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(\omega_0; x) \quad (16)$$

та, у повній аналогії з викладеним раніше, прийти для коефіцієнтів  $c_n$  до нескінченної однорідної системи лінійних алгебраїчних рівнянь вигляду (14, БН1). Повний набір цих коефіцієнтів  $\{c_n\}_{n=0}^{\infty} = \{\langle \varphi_n(\omega_0) | \psi \rangle\}_{n=0}^{\infty}$  представляє собою хвильову функцію нашої системи в представленні гармонічного осцилятора, що визначається гамільтоніаном  $\mathcal{H}^{(0)}(\omega_0)$ , а самі ці коефіцієнти залежать від частоти  $\omega_0$  як від параметра. Тепер матричні елементи  $H_{mn}$  повного гамільтоніана нашої системи  $H$  будуть визначатися іншим виразом відповідно до його розбиття  $H = \mathcal{H}^{(0)} + W$  на незбурену частину  $\mathcal{H}^{(0)}$  і оператор збурення  $W$ :

$$H_{mn} = \langle \varphi_m(\omega_0) | H | \varphi_n(\omega_0) \rangle = \mathcal{H}_{mn}^{(0)} + W_{mn}. \quad (17)$$

При цьому матричні елементи гамільтоніана нульового наближення  $\mathcal{H}^{(0)}$  (див. (8)), тобто гамільтоніана узагальненого гармонічного осцилятора, у власному представленні є діагональними та даються, відповідно до (12), виразом

$$\mathcal{H}_{mn}^{(0)} = \omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right) \delta_{mn}, \quad (18)$$

а матричні елементи оператора збурення  $W$ , виходячи з (10), записуються у вигляді:

$$W_{mn} = \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{2} \langle x^2 \rangle_{mn} + \lambda \langle x^4 \rangle_{mn}. \quad (19)$$

Далі для матричних елементів  $\langle x^2 \rangle_{mn}$  і  $\langle x^4 \rangle_{mn}$  легко отримати, враховуючи співвідношення  $x = x_0 \xi$  та вираз (15), їхнє представлення через

безрозмірні матричні елементи від безрозмірної координати  $\xi$ :

$$\langle x^2 \rangle_{mn} = x_0^2 \langle \xi^2 \rangle_{mn} = \frac{1}{\omega_0} \langle \xi^2 \rangle_{mn}, \quad (20)$$

$$\langle x^4 \rangle_{mn} = x_0^4 \langle \xi^4 \rangle_{mn} = \frac{1}{\omega_0^2} \langle \xi^4 \rangle_{mn}. \quad (21)$$

Тут матричні елементи від  $\xi^2$  і  $\xi^4$ , – ступенів безрозмірної координати, – беруться вже по безрозмірних базисних функціях  $\varphi_n(\xi)$ , на відміну від матричних елементів від розмірної координати  $x$ . Явний вигляд матричних елементів  $\langle \xi^2 \rangle_{mn}$  легко знайти безпосередньо з відомих рекурентних співвідношень для функцій  $\varphi_n(\xi)$  і відповідно записати ці елементи як

$$\begin{aligned} \langle \xi^2 \rangle_{mn} &= \langle \varphi_m(\xi) | \xi^2 | \varphi_n(\xi) \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{n(n-1)} \delta_{m,n-2} + \\ &+ \left( n + \frac{1}{2} \right) \delta_{m,n} + \frac{1}{2} \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{m,n+2}. \end{aligned} \quad (22)$$

А явний вигляд матричних елементів  $\langle \xi^4 \rangle_{mn}$  дається формулою

$$\begin{aligned} \langle \xi^4 \rangle_{mn} &= \frac{1}{4} \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} \delta_{m,n-4} + \\ &+ \frac{1}{2} (2n-1) \sqrt{n(n-1)} \delta_{m,n-2} + \frac{3}{4} (2n^2 + 2n + 1) \delta_{m,n} + \\ &+ \frac{1}{2} (2n+3) \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{m,n+2} + \\ &+ \frac{1}{4} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)} \delta_{m,n+4} \end{aligned} \quad (23)$$

– див. формулу (17, БН1). Зрештою, таким чином, з врахуванням (17) - (21) ми можемо записати матричні елементи  $H_{mn}$  повного гамільтоніана нашої системи у вигляді:

$$\begin{aligned} H_{mn} &= \omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right) \delta_{mn} + \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{2\omega_0} \langle \xi^2 \rangle_{mn} + \frac{\lambda}{\omega_0^2} \langle \xi^4 \rangle_{mn}, \\ & \quad m, n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (24)$$

Якщо тепер для конкретного чисельного розв'язку нескінченної системи лінійних алгебраїчних рівнянь вигляду (14, БН1) обмежитись у розкладі (16) і відповідно у цій системі деяким

кінцевим числом членів  $M$ , то використовуючи отримані матричні елементи (24) запишемо цю систему однорідних лінійних алгебраїчних рів-

нянь для визначення коефіцієнтів  $c_n$  у такому скінченному вигляді:

$$\sum_{n=0}^M \left[ \omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right) \delta_{mn} + \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{2\omega_0} \langle \xi^2 \rangle_{mn} + \frac{\lambda}{\omega_0^2} \langle \xi^4 \rangle_{mn} \right] c_n = E c_m, \quad m = 0, 1, 2, \dots, M. \quad (25)$$

В останніх двох формулах (24) і (25), при цьому, матричні елементи  $\langle \xi^2 \rangle_{mn}$  і  $\langle \xi^4 \rangle_{mn}$  даються простими явними формулами (22) і (23) відповідно. Для остаточних чисельних розрахунків, відповідно до системи рівнянь (25), властивостей конкретних фізичних станів ангармонічного осцилятора, тобто для розрахунку власних значень енергії  $E$  і коефіцієнтів  $c_n$ , потрібно, як і раніше, врахувати також парність цих фізичних станів, як було описано раніше. Тобто потрібно врахувати, що для основного стану системи та інших парних станів розклад (16) по базису оптимізуючих осциляторних функцій буде містити лише парні базисні функції ( $c_{2j+1} = 0$  для парних станів,  $M = 2N$ ), а для непарних станів розклад (16) буде містити лише непарні базисні функції ( $c_{2j} = 0$  для непарних станів,  $M = 2N + 1$ ).

У табл. 2 для різних  $\lambda$  наведено результати розрахунків власних значень енергії  $E_0(\lambda)$  основного рівня ангармонічного осцилятора (гамільтоніана (6) при значенні частоти  $\omega = 1$ ) зі стандартною точністю вісім значущих цифр піс-

ля коми в різних порядках розкладу (16) хвильової функції системи по узагальненому осциляторному базису з певним чином обраною частотою  $\omega_0$ . Розрахунки проводилися відповідно до вищерозглянутого оптимізованого методу, тобто значення енергії обчислювались як власні значення системи рівнянь (25). При цьому значення константи зв'язку  $\lambda$  в табл. 2 обрано в області проміжного та сильного зв'язку  $1 \lesssim \lambda \lesssim 50$ . Аналогічні результати розрахунків для значень параметра  $\lambda$  з області надсильного зв'язку  $\lambda \gtrsim 100$  наведено в табл. 3. Табл. 2 і 3 очевидно та наочно показують виключно високу швидкість збіжності та чудову ефективність методу при відповідному виборі варійованого частотного параметра  $\omega_0$  для випадку заданого фіксованого значення параметра  $\lambda$ . З результатів видно, що швидкість збіжності, яка досягається за рахунок варіювання та найбільш оптимального вибору частоти  $\omega_0$ , зовсім не спадає і залишається на одному й тому ж найвищому рівні абсолютно в усій області зміни параметра  $\lambda$ .

**Таблиця 2. Значення енергії  $E_0$  основного рівня біквадратичного ангармонічного осцилятора з частотою  $\omega = 1$ , розраховані у різних порядках  $N$  розкладу (16) по узагальненому оптимізуючому осциляторному базису  $\{\varphi_n(\omega_0; x)\}$  при деяких обраних значеннях частоти цього базису  $\omega_0$**

$N$	$\lambda = 1,$ $\omega_0 = 4,5$	$\lambda = 2,$ $\omega_0 = 4,5$	$\lambda = 5,$ $\omega_0 = 4,5$	$\lambda = 10,$ $\omega_0 = 7,5$	$\lambda = 20,$ $\omega_0 = 9,0$	$\lambda = 25,$ $\omega_0 = 9,0$	$\lambda = 50,$ $\omega_0 = 12,0$
1	0,85896477	0,96685111	1,22773634	1,53243233	1,88704830	2,00960516	2,52418732
2	0,80775832	0,95161545	1,22534297	1,50508881	1,86617258	2,00337901	2,50059745
3	0,80384895	0,95161476	1,22466262	1,50507306	1,86580169	2,00203457	2,49983826
4	0,80377138	0,95156872	1,22458924	1,50497296	1,86569885	2,00200816	2,49971522
5	0,80377090	0,95156870	1,22458854	1,50497295	1,86569634	2,00199650	2,49970938
6	0,80377065	0,95156847	1,22458712	1,50497241	1,86569585	2,00199650	2,49970887
7	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497241	1,86569580	2,00199639	2,49970877
8	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497241	1,86569580	2,00199638	2,49970877
9	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497241	1,86569580	2,00199638	2,49970877
10	0,80377065	0,95156847	1,22458704	1,50497241	1,86569580	2,00199638	2,49970877
<b>Ех.</b>	<b>0,80377065</b>	<b>0,95156847</b>	<b>1,22458704</b>	<b>1,50497241</b>	<b>1,86569580</b>	<b>2,00199638</b>	<b>2,49970877</b>

*Примітка.* Значення варійованої підгінної частоти  $\omega_0$  використаного для розкладу базису гармонічного осцилятора підібрані емпіричним чином для забезпечення найкращої швидкості збіжності. Значення константи зв'язку  $\lambda$  взято з області проміжного та сильного зв'язку  $1 \lesssim \lambda \lesssim 50$ . В останньому рядку “Ех.” (“Exact”) наведено точні значення.

Таблиця 3. Значення енергії  $E_0$  основного рівня біквдратичного ангармонічного осцилятора з частотою  $\omega = 1$ , розраховані у різних порядках  $N$  розкладу (16) по узагальненому осциляторному базису  $\{\varphi_n(\omega_0; x)\}$  при деяких обраних значеннях частоти цього базису  $\omega_0$

$N$	$\lambda = 100,$ $\omega_0 = 16,0$	$\lambda = 500,$ $\omega_0 = 17,0$	$\lambda = 1000,$ $\omega_0 = 18,5$	$\lambda = 2000,$ $\omega_0 = 24,5$	$\lambda = 5000,$ $\omega_0 = 33,0$	$\lambda = 10000,$ $\omega_0 = 60,5$	$\lambda = 20000,$ $\omega_0 = 84,0$
1	3,19240524	5,39822513	6,82756134	8,58844817	11,65172065	14,41269727	18,22762509
2	3,13167746	5,32132402	6,70885544	8,43777773	11,44619041	14,41267371	18,14967664
3	3,13162371	5,32092453	6,69477345	8,42843302	11,43200148	14,39821432	18,13771217
4	3,13138558	5,32009377	6,69477316	8,42813470	11,43169197	14,39810137	18,13733759
5	3,13138551	5,31990047	6,69435553	8,42758389	11,43093573	14,39800558	18,13723048
6	3,13138419	5,31989777	6,69422972	8,42750156	11,43080967	14,39799568	18,13723029
7	3,13138417	5,31989555	6,69422250	8,42750105	11,43080824	14,39799558	18,13722911
8	3,13138417	5,31989445	6,69422213	8,42749926	11,43080603	14,39799536	18,13722907
9	3,13138416	5,31989436	6,69422117	8,42749831	11,43080465	14,39799534	18,13722907
10	3,13138416	5,31989436	6,69422088	8,42749818	11,43080445	14,39799534	18,13722907
11	3,13138416	5,31989436	6,69422085	8,42749818	11,43080444	14,39799534	18,13722907
12	3,13138416	5,31989436	6,69422085	8,42749818	11,43080444	14,39799534	18,13722907
<b>Ех.</b>	<b>3,13138416</b>	<b>5,31989436</b>	<b>6,69422085</b>	<b>8,42749818</b>	<b>11,43080444</b>	<b>14,39799534</b>	<b>18,13722907</b>

*Примітка.* Значення варійованої підгінної частоти  $\omega_0$  використаного для розкладу базису гармонічного осцилятора підібрані емпіричним чином для забезпечення найкращої швидкості збіжності. Значення константи зв'язку  $\lambda$  взято з області надсильного зв'язку  $\lambda \gtrsim 100$ .

Запропонований метод, таким чином, дає змогу проводити розрахунки значень енергії основного стану ангармонічного осцилятора зі стандартною точністю абсолютно в усьому значущому інтервалі зміни константи зв'язку  $\lambda$  з використанням при цьому вкрай невеликого числа  $N \lesssim 10$  базисних функцій  $\varphi_n(\omega_0; x)$ , практично зовсім не збільшуючи їхньої кількості при зростанні  $\lambda$ . Отже, чисельні розрахунки в усьому інтервалі зміни константи зв'язку  $\lambda$  виявляються реально здійсненними з використанням узагальненого осциляторного базису дуже малої розмірності  $N \lesssim 10$ , оскільки звичайне типове погіршення швидкості збіжності при збільшенні параметра  $\lambda$  в даному випадку не спостерігається. Усе це стає можливим у кожному конкретному випадку заданого значення параметра  $\lambda$  завдяки правильному вдалому вибору частоти  $\omega_0$  узагальненого оптимізуючого осциляторного базису, який забезпечує дуже високу якість і правильність нульового наближення, тобто фактично близькість у певному сенсі нульового наближення, а саме – гамільтоніана  $\mathcal{H}^{(0)}(\omega_0)$ , до вихідного гамільтоніана  $H$ , – за відповідного вибору частоти  $\omega_0$ . Інакше це означає, як зазначалося, що при фіксованому  $\lambda$  вдається у даному підході досить помітно «ефективно зменшити» силу потенціалу збурення  $W$  за рахунок відповідного збільшення параметра  $\omega_0$  – див. формулу (10) і текст після неї. Вищесказане очевидним та наочним способом ілюструється згідно з табл. 2 і

3 вже в перших рядках цих таблиць, з яких видно, що врахування лише перших кількох членів розкладу по узагальненому осциляторному базису з належним чином обраною частотою  $\omega_0$  забезпечує точність розрахованих значень енергії  $\gtrsim 95\%$  від істинної, що ще раз свідчить про високу якість нульового наближення при відповідним чином обраному значенні параметра  $\omega_0$ . При цьому з табл. 2 і 3 видно, що необхідне зростання варійованого частотного параметра  $\omega_0$  у міру збільшення значення параметра  $\lambda$  є достатньо помірним і не перевищує зростання на два порядки порівняно з початковим значенням  $\omega_0 = 1$ , яке відповідає розгляду в БН1, – тобто параметр  $\omega_0$  змінюється в не дуже широкому інтервалі  $1 \leq \omega_0 \leq 100$  при всіх розрахунках у практично значимій області зміни  $\lambda$ . Ця обставина свідчить про можливість зручної і нетрудомісткої процедури чисельного вибору оптимального конкретного значення параметра  $\omega_0$ , тим паче, що фіксація параметра  $\omega_0$  у практичних розрахунках можлива з невеликим ступенем точності  $\sim 0,2 \div 0,7$ , чого виявляється достатнім для реального встановлення області найкращої збіжності по  $N$ , тобто по кількості використаних у розкладі осциляторних базисних функцій. У цілому ж вибір оптимального значення базисної частоти  $\omega_0$ , яке забезпечує найвищу швидкість збіжності розкладів, здійснюється достатньо легко та надійно послідовним поступальним

збільшенням значення цієї частоти у міру зростання значень параметра  $\lambda$ , для яких необхідно провести відповідний розрахунок. Це тим більше легко здійснити при конкретних розрахунках у силу факту все більш швидкої збіжності застосовуваних розкладів і необхідності враховувати при цьому невелику кількість базисних функцій. Отже, запропонований оптимізований метод надає можливість дуже зручного, швидкого та ефективного розрахунку енергії основного стану ангармонічного осцилятора в усьому практично значущому інтервалі зміни константи зв'язку  $\lambda$  від нуля до найбільших її значень. Згідно з цим методом аналогічним чином можна також розрахувати значення енергії збуджених станів як відповідних власних значень системи рівнянь (25), тобто власних значень скінченної матриці гамільтоніана системи з елементами (24) у представленні гармонічного осцилятора, що визначається гамільтоніаном нульового наближення  $\mathcal{H}^{(0)}(\omega_0)$ . При цьому зростання порядку  $N$  оптимізуючого осциляторного базису, необхідного для розрахунків збуджених станів, є помірним і відповідні обчислення на основі розв'язання системи рівнянь (25) не викликають труднощів.

Підібрані емпіричним чином для кожного  $\lambda$  значення варійованої підгінної частоти  $\omega_0$  оптимізуючого осциляторного базису, наведені в табл. 2 і 3, дають можливість елементарним чином описати цю емпіричну залежність  $\omega_0(\lambda)$  простою формулою. Оскільки константа зв'язку  $\lambda$  змінюється у нас при цьому в дуже широких границях, то практично зручно досліджувати залежність частоти  $\omega_0$  від параметра  $\mu = \ln \lambda$ . Ми запишемо цю залежність у вигляді простої лінійно-степеневі формули вигляду

$$\omega_0 = a + b\mu + c\mu^\alpha, \quad \mu = \ln \lambda, \quad (26)$$

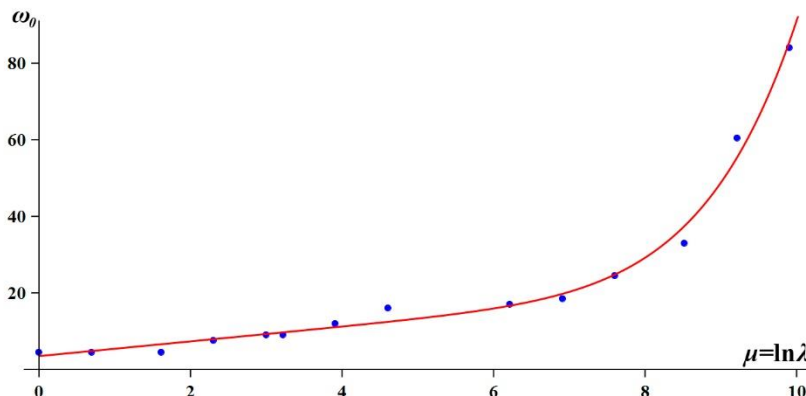


Рис. 4. Значення варійованої підгінної частоти  $\omega_0$  оптимізуючого осциляторного базису з табл. 2 і 3 залежно від параметра  $\mu = \ln \lambda$  (сині точки), а також опис цієї залежності емпіричною формулою (26) з параметрами (27) (червона крива). (Див. кольоровий рисунок на сайті журналу.)

де значення параметрів  $a, b, c, \alpha$  визначимо шляхом підгонки даної залежності згідно з методом найменших квадратів. Отримані в результаті значення цих параметрів такі:

$$a = 3,47542, \quad b = 1,92476, \\ c = 2,25163 \cdot 10^{-7}, \quad \alpha = 8,48258. \quad (27)$$

Формула (26) зі значеннями параметрів (27) дуже добре описує емпіричну залежність  $\omega_0(\mu)$ , як це видно з рис. 4. Також рис. 4 показує, що деякий розкид значень частоти  $\omega_0$ , який має місце в цій залежності, міг би бути виправлений з метою забезпечення більш плавного характеру даної залежності деяким уточненням та подальшим варіюванням емпіричних значень величини  $\omega_0$ . Однак насправді особливо точний розрахунок і точне визначення значень параметра  $\omega_0$  великого сенсу не мають, оскільки висока швидкість збіжності розкладів по оптимізуючому осциляторному базису має місце в достатньо широкому інтервалі зміни параметра  $\omega_0$  в околі вже визначених його значень, як нами вже підкреслювалося раніше. Зокрема, практичні розрахунки показують, що розраховане згідно з формулою (26) з параметрами (27) значення базисної частоти  $\omega_0$  забезпечує для випадку стандартної точності збіжність розкладів з використанням узагальненого осциляторного базису порядку  $N \lesssim 15 \div 20$ . Таким чином, формула (26) з параметрами (27) дає дуже хороше нульове наближення для значень частоти  $\omega_0$  без усяких подальших підгонок і обчислень, що може бути зручно використано в практичних розрахунках.

Таблиця 4. Значення коефіцієнтів  $c_{2n}$  розкладу (16) хвильової функції основного стану  $\psi_0(\lambda; x)$  біквдратичного ангармонічного осцилятора по узагальненому осциляторному базису  $\{\varphi_n(\omega_0; x)\}$  при значеннях константи зв'язку  $\lambda = 1, \lambda = 10, \lambda = 100, \lambda = 1000$  і  $\lambda = 10000$

$n$	$c_{2n}(\lambda = 1),$ $\omega_0 = 4,5$	$c_{2n}(\lambda = 10),$ $\omega_0 = 7,5$	$c_{2n}(\lambda = 100),$ $\omega_0 = 16,0$	$c_{2n}(\lambda = 1000),$ $\omega_0 = 18,5$	$c_{2n}(\lambda = 10000),$ $\omega_0 = 60,5$
0	9,55355013e-1	9,70655883e-1	9,69692134e-1	9,99110157e-1	9,84431582e-1
1	2,84244890e-1	2,37539027e-1	2,41318709e-1	2,02506482e-2	1,75647288e-1
2	7,89514339e-2	3,74117438e-2	3,81988355e-2	-3,60491147e-2	3,57616856e-4
3	1,62794383e-2	-8,29521468e-4	-1,01401691e-3	8,17925100e-3	-6,48367316e-3
4	1,80780224e-3	-1,42597453e-3	-1,50315668e-3	6,66001463e-4	4,04047971e-4
5	-1,37740275e-4	5,90643593e-6	1,87534663e-5	-1,28018030e-3	3,87492026e-4
6	-8,07068788e-5	7,93920794e-5	8,53217477e-5	5,23682996e-4	-1,00195796e-4
7	-3,27100575e-6	-5,26233008e-6	-6,86537228e-6	-7,68673541e-5	-1,30398138e-5
8	3,33815176e-6	-5,14988747e-6	-5,51512709e-6	-4,54300498e-5	1,33585634e-5
9	3,32277500e-7	1,07229017e-6	1,28539912e-6	4,15097364e-5	-2,47563602e-6
10	-1,70606806e-7	2,65593030e-7	2,65016879e-7	-1,75893435e-5	-7,57963449e-7
11	-1,97791918e-8	-1,45365311e-7	-1,68338027e-7	3,21697076e-6	5,70625900e-7
12	1,09204812e-8	4,80063336e-9	1,01742250e-8	1,52593638e-6	-1,14795659e-7
13	8,77385921e-10	1,35307032e-8	1,48626978e-8	-1,79512828e-6	-3,23270182e-8
14	-8,06337466e-10	-3,89915067e-9	-4,91627195e-9	9,63777679e-7	2,98894155e-8
15	-3,07169601e-12	-4,35983694e-10	-3,04869212e-10	-2,99666349e-7	-8,32306907e-9
16	6,14995240e-11	5,71670561e-10	6,62201585e-10	-3,40100537e-9	-7,72938607e-10
17	-6,40101015e-12	-1,22635730e-10	-1,69576799e-10	7,59003755e-8	1,67895553e-9
18	-4,24338436e-12	-3,04678553e-11	-2,66458376e-11	-5,66906002e-8	-7,02549038e-10
19	1,14886008e-12	2,36086868e-11	2,78333029e-11	2,18045343e-8	1,07150382e-10

*Примітка.* Значення частоти  $\omega_0$  використаного для розкладу базису гармонічного осцилятора обрано для цих випадків згідно з табл. 2 і 3 відповідно такими, що дорівнюють  $\omega_0 = 4,5, \omega_0 = 7,5, \omega_0 = 16,0, \omega_0 = 18,5$  і  $\omega_0 = 60,5$ . Порядок розкладу по узагальненому осциляторному базису обрано таким, що дорівнює  $N = 19$ .

Очевидно, що надалі, при заданому значенні  $\lambda$  та вже визначеному для цього випадку оптимальному значенні частоти базису  $\omega_0$ , можна розрахувати для заданого стану значення коефіцієнтів  $c_n$ , набір яких є хвильовою функцією системи в осциляторному представленні, що відповідає гармонічному осцилятору з частотою  $\omega_0$  – при необхідному відповідному врахуванні парності даного стану. У табл. 4 наведено розраховані таким чином значення коефіцієнтів  $c_{2n}$  розкладу (16) хвильової функції  $\psi_0(\lambda; x)$  основного стану системи по узагальненому осциляторному базису для деяких значень константи зв'язку  $\lambda$ , які охоплюють увесь практично значимий інтервал її зміни. При цьому враховувалося 20 узагальнених базисних функцій розкладу. Результати табл. 4 підтверджують дуже високу швидкість збіжності розкладів по базису  $\{\varphi_n(\omega_0; x)\}_{n=0}^{\infty}$  при відповідним чином обраному оптимальному значенні частоти  $\omega_0$  для будь-яких практично необхідних значень параметра  $\lambda$ . При цьому жодного погіршення швидкості збіж-

ності коефіцієнтів  $c_{2n}$  у міру зростання параметра  $\lambda$  у даному випадку практично не спостерігається, як і при розрахунках енергії зв'язку. Отже, табл. 4 дає табульовану хвильову функцію системи в осциляторному представленні, що визначається гамільтоніаном  $\mathcal{H}^{(0)}(\omega_0)$ , для цілого ряду типових значень константи зв'язку  $\lambda$ . Будь-яке конкретне значення хвильової функції  $\psi_0(\lambda; x)$  в координатному представленні при заданому значенні координати  $x$  легко може бути отримано з розкладу (16) при заданому значенні параметра  $\omega_0$ . При цьому при використаних 20 базисних функціях  $\varphi_n(\omega_0; x)$  розкладу досягнута точність розрахунку коефіцієнтів  $c_{2n}$ , тобто хвильової функції системи в осциляторному представленні, становить величину  $\lesssim 10^{-10} \div 10^{-8}$  у всій області зміни  $\lambda$ . Табл. 4 ще раз наочно демонструє чудову якість використаного в даному підході нульового наближення при найбільш оптимальному виборі параметра  $\omega_0$  у випадку розкладу (16) по узагальненому осциляторному базису, оскільки вже нульовий

коефіцієнт розкладу  $c_0$  вносить вклад на рівні  $\gtrsim 90\%$ , тобто основний домінуючий вклад, при будь-яких значеннях параметра  $\lambda$ . А врахування перших двох членів розкладу забезпечує вклад на рівні  $\gtrsim 99\%$ .

Ту ж саму хорошу якість нульового наближення у даному підході видно з рис. 5, на якому зображено розраховану відповідно до табл. 4 хвильову функцію основного стану системи  $\psi_0(\lambda = 100; x)$  в координатному представленні для випадку значення константи зв'язку  $\lambda = 100$  порівняно з хвильовими функціями гармонічного осцилятора  $\varphi_0(\omega_0 = 1; x)$  і  $\varphi_0(\omega_0 = 16; x)$ . При цьому останні дві функції дають нульове набли-

ження відповідно у традиційному підході та у підході розкладу по узагальненому осциляторному базису з відповідним чином обраним частотним параметром  $\omega_0$ . Набагато краща якість нульового наближення у другому випадку з рис. 5 очевидна, як і з наведеного раніше рис. 3, на якому було зображено відповідні потенціали нульового наближення порівняно з потенціалом збурення. Отже, табл. 4 і рис. 5 знову підтверджують тезу про те, що винятково висока швидкість збіжності розкладів по узагальненому осциляторному базису пояснюється дуже високою якістю нульового наближення в даному підході, що досягається варіюванням частоти  $\omega_0$  осциляторного базису  $\{\varphi_n(\omega_0; x)\}_{n=0}^{\infty}$ .

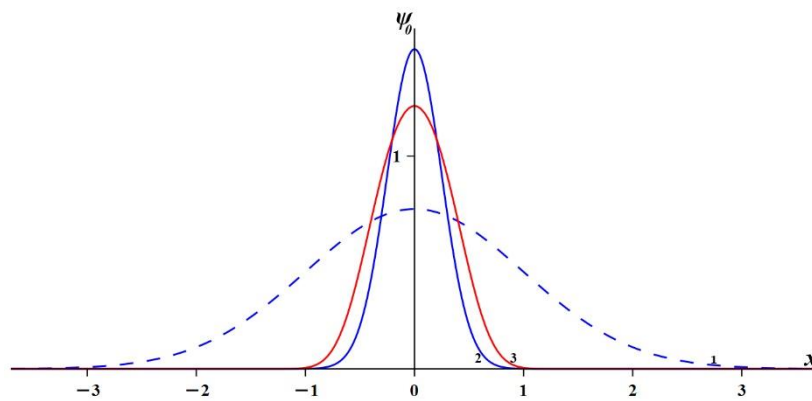


Рис. 5. Хвильові функції основного стану гармонічного осцилятора  $\varphi_0(\omega_0 = 1; x)$  при значенні частоти  $\omega_0 = 1$  (штрихована синя крива 1) і  $\varphi_0(\omega_0 = 16; x)$  при значенні частоти  $\omega_0 = 16$  (суцільна синя крива 2), а також хвильова функція основного стану бікватратичного ангармонічного осцилятора  $\psi_0(\lambda = 100; x)$  при значенні константи зв'язку  $\lambda = 100$  (червона крива 3). Порівняти з рис. 3. (Див. кольоровий рисунок на сайті журналу.)

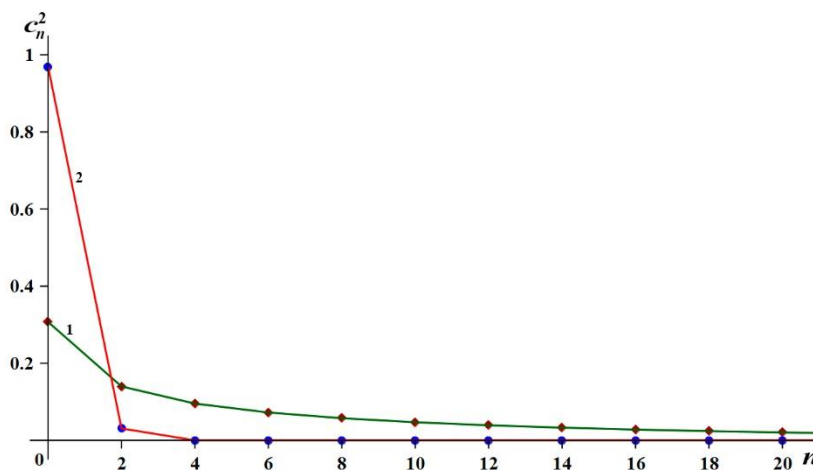


Рис. 6. Залежність квадратів  $c_n^2$  коефіцієнтів розкладу хвильової функції системи  $\psi_0(\lambda = 10000; x)$  по осциляторному базису від індексу  $n$  для випадку стандартного розкладу по базису з одиничною частотою (зелена ламана 1 з точками у вигляді темнокоричневих ромбів) та для випадку розкладу по узагальненому базису з частотою  $\omega_0 = 60,5$  (червона ламана 2 з точками у вигляді синіх кружечків). (Див. кольоровий рисунок на сайті журналу.)

На рис. 6 для ілюстративно-демонстраційних цілей наведено залежність квадратів  $c_n^2$  коефіцієнтів розкладу хвильової функції основного ста-

ну системи  $\psi_0(\lambda = 10000; x)$  по осциляторному базису від індексу  $n$ , який є головним квантовим числом гармонічного осцилятора – для випадку

стандартного розкладу та для випадку розкладу по оптимізуєчому узагальненому базису з відповідним чином обраною його частотою (при типовому значенні константи зв'язку  $\lambda = 10000$  з області надсильного зв'язку). При цьому слід відзначити, що величини  $c_n^2$  є ваговими коефіцієнтами, які дають вагу, з якою входить до розкладу відповідна осциляторна функція (відповідний «квант» гармонічного осцилятора) і вони часто використовуються для наочності представлення осциляторних розкладів.

Рис. 6 наочно демонструє значне суттєве покращення збіжності квадратів коефіцієнтів розкладу хвильової функції по осциляторному базису для випадку використання оптимізуєчого базису з відповідним чином обраною його частотою – у даному випадку, згідно з табл. 3,  $\omega_0(\lambda = 10000) = 60,5$ . З рис. 6 наочно видно, що у цьому другому випадку врахування лише двох трьох коефіцієнтів робить головний домінуючий внесок на рівні  $\approx 99\%$ , як це було видно раніше з табл. 4. А всі подальші коефіцієнти близькі до нуля і сумарно роблять внесок на рівні  $\lesssim 1\%$ . Очевидно, при цьому, що покращення збіжності по узагальненому базису відіграє тим більшу і значнішу роль, чим більшим є значення параметра ангармонізму  $\lambda$ . Нагадаємо також, що в даному випадку присутні і відмінні від нуля лише коефіцієнти з парним індексом.

Набагато зручнішими та такими, що вимагають врахування значно меншої кількості базисних функцій у розкладах, є також прецизійні

розрахунки з великою кількістю значущих цифр на основі вищеописаного вдосконаленого розкладу по узагальненому осциляторному базису з оптимально обраним параметром  $\omega_0$ . У табл. 5 наведено результати прецизійних розрахунків з точністю 20 значущих цифр після коми значень енергії основного стану ангармонічного осцилятора  $E_0(\lambda)$  у випадку деяких значень константи зв'язку  $\lambda$  зі всієї практичної області її зміни. Результати показують, що прецизійні розрахунки з точністю 20 значущих цифр можливі при будь-яких, скільки завгодно великих, значеннях параметра  $\lambda$  з використанням оптимізуєчого осциляторного базису дуже малої розмірності  $N \lesssim 25 \div 30$ , тобто приблизно при триразовому збільшенні розмірності базису порівняно з випадком розрахунків зі стандартною точністю. При цьому дуже суттєво, що необхідна у цьому випадку для обчислень розмірність осциляторного базису практично не збільшується зі зростанням  $\lambda$ . Отже, прецизійні розрахунки зручно реалізувати в рамках підходу розкладу по узагальненому осциляторному базису при необхідній дуже невеликій кількості базисних функцій розкладу. Звичайно, що основою цього, як і раніше, є відповідний вибір найоптимальнішого значення варійованої підгінної частоти  $\omega_0$ . Підкреслимо також, що навіть при дуже малих значеннях константи зв'язку  $\lambda$  є дуже вигідним і ефективним обирати значення частотного параметра  $\omega_0$  більшими за одиницю, як видно з табл. 5.

Таблиця 5. Прецизійний розрахунок значень енергії  $E_0$  основного рівня ангармонічного осцилятора з точністю 20 значущих цифр після коми для деяких значень константи зв'язку  $\lambda$

$\lambda$	$\omega_0$	$N$	$E_0$
0,1	2,5	14	0,55914632718351957672
0,25	3,7	15	0,62092702982574866086
0,5	3,7	16	0,69617582076514592783
1	3,7	19	0,80377065123427376935
5	7,0	19	1,22458703605919345913
10	7,2	21	1,50497240777889109916
50	12,0	21	2,49970877256879391465
100	13,0	26	3,13138416493754427316
1000	22,5	29	6,69422085050403096950
10000	69,0	22	14,39799534352480703004
20000	87,0	22	18,13722906686841773519

*Примітка.*  $N$  – мінімальний порядок розкладу (16) по узагальненому осциляторному базису для досягнення даного ступеня точності. У другому стовпчику наведено оптимальні значення частоти  $\omega_0$  використаного для розкладу базису узагальненого гармонічного осцилятора, підібрані емпіричним чином для забезпечення найкращої швидкості збіжності.

У недавніх роботах [28, 29] у якості деякого реперного еталонного прецизійного значення енергії основного рівня біквдратичного ангар-

монічного осцилятора було розраховано значення цієї енергії  $E_0(\lambda = 1/4)$  при значенні константи зв'язку  $\lambda = 1/4$ . При цьому дане значення

було розраховане з точністю 40 значущих цифр у роботі [28] і з точністю 246 значущих цифр у роботі [29]. Для перевірочних та ілюстративних цілей нами було розраховане дане значення ви-

щевикладеним методом розкладу по оптимізуючому осциляторному базису з точністю 250 значущих цифр:

$$E_0(\lambda = 1/4) = 0.6209270298257486608580357329871206982000172536191389825423673250629627481887688839793913513034794560836016187600734766248910857683080990659384025800845303970247374743476634069544930755660930523968593024724863926019751363572931088715294391170922759124. \quad (28)$$

**Таблиця 6.** Необхідний мінімальний порядок  $N$  розкладу (16) по узагальненому осциляторному базису (при обраній частоті базису  $\omega_0 = 3,7$ ) та необхідне число  $Y$  точок сітки Лагранжа згідно з роботою [29] для досягнення заданої точності розрахунку Digits значущих цифр у прецизійному обчисленні енергії основного рівня  $E_0(\lambda = 1/4)$  біквдратичного ангармонічного осцилятора при значенні константи зв'язку  $\lambda = 1/4$

Digits	$N$	$Y$
8	7	25
14	12	50
20	15	75
25	21	100
33	27	150
44	38	200
50	43	250
59	52	300
72	66	400
87	82	500
145	152	1000
237	284	1900
246	297	2000
250	304	—

Наш результат (28) точно відтворив перші 245 значущих цифр роботи [29], а відмінність на одиницю в останній значущій цифрі роботи [29], очевидно, пояснюється недосягнутою точністю у визначенні останньої цифри. У табл. 6 для ілюстративних цілей наведено значення порядку  $N$  узагальненого осциляторного базису, необхідні для досягнення деякої заданої точності розрахунку “Digits” значущих цифр при обчисленні значення енергії  $E_0(\lambda = 1/4)$ . При цьому значення підгінного параметра  $\omega_0$  обиралося фіксованим і таким, що дорівнює  $\omega_0 = 3,7$  – згідно з табл. 5. Також у табл. 6 для порівняння наведено необхідну для досягнення точності “Digits” кількість точок Лагранжа  $Y$  у методі сіток Лагранжа згідно з роботою [29]. Результати табл. 6 показують, що в цілому необхідне для досягнення усе більшої точності збільшення числа базисних функцій, використаних в узагальненому розкладі (16), є досить помірним. Таким чином, результати табл. 5 і 6 і порівняння розрахованого значення (28) енергії  $E_0(\lambda = 1/4)$  з його еталонним реперним значенням свідчать про зручну можливість високоточних прецизійних розрахунків

значень енергії ангармонічного осцилятора на основі методу розкладу (16) по оптимізуючому осциляторному базису. При цьому, звичайно, кожного разу повинна бути обрана найбільш оптимальна підгінна частота  $\omega_0$  цього базису, що може бути швидко зроблено через відповідний розрахунок із врахуванням невеликої кількості значущих цифр у розрахунковому результаті. До того ж у цьому випадку дуже зручною особливістю даного методу є економна можливість його застосування при будь-яких, навіть найбільших, значеннях константи зв'язку  $\lambda$  практично без збільшення розмірності базису  $N$  за рахунок оптимального вибору параметра  $\omega_0$ .

#### 4. Висновки

Загалом слід відзначити, що було запропоновано багато різних методів для дослідження властивостей і розрахунків характеристик квантового ангармонічного осцилятора. Ці методи відрізняються між собою як за складністю їхнього застосування, так і за ефективністю. При цьому кожний із запропонованих методів має свої переваги і недоліки. З нашої точки зору, ці різні ме-



тоди та підходи до вивчення осцилятора повинні розглядатися не як конкуруючі між собою, а як такі, що зручно доповнюють один одного – тим більше, що розвиток і застосування будь-якого з них може в подальшому виявитися актуальним і корисним для дослідження інших аналогічних систем. З розвинутих і застосовуваних останнім часом методів розрахунку властивостей ангармонічного осцилятора можна відзначити, наприклад, такі сучасні вискоєфективні методи, як метод сіток Лагранжа [13, 29] та метод Ріккати - Паде [30]. Однак слід підкреслити, що розглянутий і використаний у даній роботі метод розкладу хвильової функції системи по осциляторному базису є давнім класичним традиційним підходом до розв'язання квантових задач, який, до того ж, є одним з найпростіших у застосуванні. Численні успішні застосування даного методу свідчать про те, що метод розкладу по осциляторному базису дає цілий ряд переваг у своєму використанні і є надзвичайно зручним та привабливим завдяки своїй простоті, універсальності та загальності. Також вкрай суттєвою перевагою даного методу є можливість простого і надійного розрахунку не лише значень енергії осцилятора, але і хвильових функцій різних станів системи, чого не дають можливості зробити багато інших методів. Отже, представлений метод надає, крім іншого, дуже зручний і точний спосіб розрахунку хвильової функції системи для будь-якого значення константи зв'язку  $\lambda$ . Таким чином, розглянутий метод розкладу по осциляторному базису дає змогу досить легко розрахувати значення енергії основного і збуджених станів осцилятора для широкого інтервалу зміни параметра  $\lambda$ . Основою методу при цьому є діагоналізація скінченної симетричної матриці гамільтоніана системи в її осциляторному представленні. Тобто, задача знаходження власних рівнів енергії і відповідних їм власних хвильових функцій ангармонічного осцилятора у цьому підході зводиться до задачі знаходження власних значень і власних векторів скінченної дійсної симетричної квадратної матриці гамільтоніана системи у представленні гармонічного осцилятора. Задача даного типу про визначення власних значень і власних векторів деякої квадратної дійсної симетричної матриці скінченного порядку  $N$  є класичною задачею, методи розв'язання якої добре розроблені. Швидкість збіжності осциляторних розкладів при конкретних розрахунках виявляється дуже високою для широкого інтервалу зміни параметра  $\lambda$ , хоча у традиційному підході вона і знижується зі зростанням  $\lambda$ . Загалом для розрахунків значень енергії рівнів зі стандартною точністю вісім значущих цифр у

всій практично необхідній області зміни параметра  $\lambda$  є цілком достатнім вибір порядку осциляторного розкладу  $N \lesssim 1000$ . Отже, результати наших розрахунків демонструють можливість розглянутого метода гарантовано отримувати значення енергії широкого спектра збуджених станів осцилятора в широкому діапазоні зміни параметра  $\lambda$  з використанням базису осциляторних функцій не дуже великої розмірності  $N \lesssim 1000$ . Таким чином, даний метод вивчення ангармонічного осцилятора на основі розкладу хвильової функції по осциляторному базису дає дуже зручну можливість розрахунку всіх фізичних характеристик системи, включаючи розрахунок хвильової функції для різних станів, на основі використання розкладів не дуже високого порядку. При цьому, завдяки розробленості методів розв'язання задачі про визначення власних значень і власних векторів матриць, розрахунок власних значень енергії системи та коефіцієнтів осциляторного розкладу, що представляють собою хвильову функцію в осциляторному представленні, не викликає труднощів.

Основним результатом даної роботи є запропонований спосіб значного прискорення збіжності осциляторних розкладів за рахунок варіювання параметра частоти узагальнених осциляторних базисних функцій з довільною частотою, по яких нами запропоновано проводити розклад. Цей підхід дає змогу дуже суттєво підвищити ефективність та оптимальність застосованого методу за рахунок більш ефективного і раціонального вибору параметра частоти узагальненого гамільтоніана нульового наближення  $\mathcal{H}^{(0)}(\omega_0)$ . А саме, за рахунок розумного вибору частоти гамільтоніана нульового наближення його можна зробити набагато кращим і оптимальнішим нульовим наближенням, значно ближчим до вихідного повного гамільтоніана. Таким чином, більш ефективний вибір частотного параметра нульового наближення, а саме – його збільшення для випадку більших значень константи зв'язку  $\lambda$ , здатен дуже суттєво підвищити якість та адекватність нульового наближення. Отримані результати чисельних розрахунків показують надзвичайно високу швидкість збіжності та чудову ефективність запропонованого підходу при відповідному виборі варіюваного частотного параметра для випадку заданого фіксованого значення параметра  $\lambda$ . Виявляється, що швидкість збіжності, досягнута за рахунок варіювання та найбільш оптимального вибору частоти базису розкладу, практично абсолютно не спадає і залишається на одному і тому ж найвищому рівні в усій області зміни параметра  $\lambda$ .

Як результат, запропонований метод прискорення збіжності дає можливість проводити розрахунки значень енергії ангармонічного осцилятора зі стандартною точністю цілковито в усьому значущому інтервалі зміни параметра  $\lambda$ , використовуючи дуже невелику кількість  $N \lesssim 10$  базисних функцій, зовсім не збільшуючи їх кількість при зростанні  $\lambda$ . Збіжність хвильової функції системи в осциляторному представленні також при цьому значно прискорюється, що дає змогу надійно і точно розраховувати хвильову функцію для будь-яких практично цікавих значень параметра  $\lambda$ . Також набагато зручнішими і вимагаючими врахування відносно малої кількості базисних функцій у розкладах є при цьому прецизійні розрахунки з великою кількістю значущих цифр, які використовують поліпшені розклади по узагальненому осциляторному базису з оптимально обраною його частотою. Отже, практичні розрахунки в усьому інтервалі зміни  $\lambda$  виявляються реалізовними на основі запропонованого підходу варіювання частоти оптимізуемого осциляторного базису з використанням базису дуже невеликої розмірності. У результаті підхід на основі розкладу по оптимізуемому осциляторному базису з підгінною частотою фактично дає змогу вирішити в даному випадку проблему сильного зв'язку, оскільки кількість необхідних для розрахунків врахованих базисних функцій не збільшується зі зростанням параметра  $\lambda$ . Таким чином, цей підхід дає можливість досить просто і ефективно практично повністю розв'язати задачу про біквадратичний ангармонічний осцилятор, забезпечуючи можливість відносно легкого розрахунку при будь-яких значеннях константи зв'язку всіх його фізичних характеристик, вклю-

чаючи енергії основного і збуджених станів, а також хвильові функції цих станів. Загалом метод розв'язання квантових задач на основі розкладу хвильової функції системи по осциляторному базису ще раз продемонстрував свою зручність, простоту і надзвичайну ефективність, а його модифікація у вигляді застосування розкладу по узагальненому осциляторному базису з деякою варійованою підгінною частотою виявилася дуже продуктивною та плідною. Цей покращений метод розкладу може бути застосований для розв'язання також інших аналогічних задач, зокрема для вивчення та розрахунків характеристик інших осциляторних моделей з більш сингулярними ангармонічними типами збурень. Також є серйозна надія на можливість застосування даного методу до вивчення важливих фізичних ефектів квантового тунелювання у різноманітних фізичних квантовомеханічних системах, які описуються гамільтоніанами типу квантового ангармонічного осцилятора – опису їх, дослідженню та вивченню їхніх властивостей. У зв'язку з цим, зокрема, важливим і перспективним було б дослідження можливості застосування розробленого вище методу до розрахунку комплексних значень енергії у випадку відповідних осциляторних гамільтоніанів.

На завершення 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. В.А. Бабенко, О.В. Нестеров. Про біквадратичний ангармонічний осцилятор – підхід у рамках розкладу по осциляторному базису. I. Дослідження та розрахунок енергій основного і збуджених станів. *Ядерна фізика та енергетика* 25(3) (2024) 216. / V.A. Babenko, A.V. Nesterov. The quartic anharmonic oscillator – an oscillator-basis expansion approach. I. Energy levels study and calculation. *Nucl. Phys. At. Energy* 25(3) (2024) 216. (Ukr)
2. С.М. Bender, Т.Т. Wu. Anharmonic oscillator. *Phys. Rev.* 184 (1969) 1231.
3. F.T. Hioe, D. Macmillen, E.W. Montroll. Quantum theory of anharmonic oscillators: Energy levels of a single and a pair of coupled oscillators with quartic coupling. *Phys. Rep.* 43 (1978) 305.
4. К. Ицксон, Ж.-Б. Зюбер. *Квантовая теория поля*. Том 2 (Москва: Мир, 1984) 400 с. / С. Itzykson, J.-B. Zuber. *Quantum Field Theory* (New York: McGraw-Hill, 1980) 705 p.
5. G.A. Arteca, F.M. Fernández, E.A. Castro. *Large Order Perturbation Theory and Summation Methods in Quantum Mechanics* (Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1990) 644 p.
6. J.C. Le Guillou, J. Zinn-Justin (Eds.). *Current Physics-Sources and Comments*. Book series. Vol. 7. *Large-Order Behaviour of Perturbation Theory* (Amsterdam: Elsevier Science Publishers, 1990) 580 p.
7. J. Zinn-Justin. *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*. 4<sup>th</sup> edn. (Oxford: Clarendon Press, 2002) 1054 p.
8. G. Lévai, J.M. Arias. Search for critical-point nuclei in terms of the sextic oscillator. *Phys. Rev. C* 81 (2010) 044304.
9. A.A. Raduta, P. Baganu. 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.
10. R. Budaca. Quartic oscillator potential in the  $\gamma$ -rigid regime of the collective geometrical model. *Eur. Phys. J. A* 50 (2014) 87.

11. P. Buganu, R. Budaca. Analytical solution for the Davydov-Chaban Hamiltonian with a sextic potential for  $\gamma = 30^\circ$ . *Phys. Rev. C* 91 (2015) 014306.
12. M.M. Hammad et al. Critical potentials and fluctuations phenomena with quartic, sextic, and octic anharmonic oscillator potentials. *Nucl. Phys. A* 1004 (2020) 122036.
13. A.V. Turbiner, J.C. del Valle Rosales. *Quantum Anharmonic Oscillator* (Singapore: World Scientific, 2023) 286 p.
14. A.S. Davydov, A.A. Chaban. Rotation-vibration interaction in non-axial even nuclei. *Nucl. Phys.* 20 (1960) 499.
15. А.С. Давыдов. *Возбужденные состояния атомных ядер* (Москва: Атомиздат, 1967) 262 с. / A.S. Davydov. *Excited States of Atomic Nuclei* (Moskva: Atomizdat, 1967) 262 p. (Rus)
16. И.Е. Кашуба, Ю.В. Породинский, Е.Ш. Суховицкий. Применение модели Давыдова-Чабана для описания рассеяния быстрых нейтронов четно-четными ядрами. *Ядерная физика* 48 (1988) 677. / I.E. Kashuba, Y.V. Porodzinskii, E.S. Sukhovitskii. Use of the Davydov-Chaban model for the description of fast neutrons by even-even nuclei. *Sov. J. Nucl. Phys.* 48 (1988) 1012.
17. И.Е. Кашуба, О.И. Давидовская. Спиновая зависимость формы четно-четного ядра в модели Давыдова-Чабана. *Ядерная физика* 65 (2002) 1446. / I.E. Kashuba, O.I. Davidovskaya. Spin dependence of the shape of even-even nuclei within the Davydov-Chaban model. *Phys. Atom. Nucl.* 65 (2002) 1411.
18. J.P. Davidson. Rotations and vibrations in deformed nuclei. *Rev. Mod. Phys.* 37 (1965) 105.
19. 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.
20. М. Абрамовиц, И. Стиган (ред.). *Справочник по специальным функциям* (Москва: Наука, 1979) 832 с. / M. Abramowitz, I.A. Stegun (Eds.). *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (Washington, D.C.: National Bureau of Standards, 1964) 1046 p.
21. И.Е. Кашуба, Е.Ш. Суховицкий. Вычисление функций параболического цилиндра в моделях динамической структуры ядра и нуклон-ядерного рассеяния. *Препринт. Ин-т ядерных исслед. АН УССР КИЯИ-87-4* (Киев, 1987) 19 с. / I. Ye. Kashuba, Ye. Sh. Sukhovitsky. Calculation of functions of a parabolic cylinder in models of dynamic nuclear structure and nucleon-nuclear scattering. *Preprint. Institute for Nuclear Research NAS of UkrSSR KIYI-87-4* (Kyiv, 1987) 19 p. (Rus)
22. А.К. Зайченко, И.Е. Кашуба. Вычисление функции параболического цилиндра в ядерно-физических исследованиях. *Препринт. Ин-т ядерных исслед. НАН Украины КИЯИ-01-3* (Киев, 2001) 14 с. / A.K. Zajchenko, I.E. Kashuba. Evaluation of the parabolic cylinder function in the context of nuclear physics. *Preprint. Institute for Nuclear Research NAS of Ukraine KIYI-01-3* (Kyiv, 2001) 14 p. (Rus)
23. M. Garai, D.A. Barlow. Taking the road less traveled: Solving the one-dimensional quantum oscillator using the parabolic-cylinder equation. [arXiv:2401.07913v1 \[quant-ph\]](https://arxiv.org/abs/2401.07913v1).
24. А. Найфэ. *Введение в методы возмущений* (Москва: Мир, 1984) 535 с. / A.H. Nayfeh. *Introduction to Perturbation Techniques* (New York: Wiley, 1981) 519 p.
25. F. Verhulst. *Nonlinear Differential Equations and Dynamical Systems* (Berlin: Springer, 1996) 306 p.
26. V.S. Vasilevsky, F. Arickx. Algebraic model for quantum scattering: Reformulation, analysis, and numerical strategies. *Phys. Rev. A* 55 (1997) 265.
27. V.S. Vasilevsky, M.D. Soloha-Klymchak. T-matrix in discrete oscillator representation. *Ukr. J. Phys.* 60 (2015) 297.
28. P. Okun, K. Burke. Uncommonly accurate energies for the general quartic oscillator. *Int. J. Quantum Chem.* 121 (2021) e26554.
29. A.V. Turbiner, J.C. del Valle. Comment on: Uncommonly accurate energies for the general quartic oscillator. *Int. J. Quantum Chem.* 121 (2021) e26766.
30. F.M. Fernández, J. Garcia. Highly accurate calculation of the real and complex eigenvalues of one-dimensional anharmonic oscillators. *Acta Polytech.* 57 (2017) 391.

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

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

\*Corresponding author: [pet2@ukr.net](mailto:pet2@ukr.net)

## THE QUARTIC ANHARMONIC OSCILLATOR – AN OSCILLATOR-BASIS EXPANSION APPROACH. II. STUDY OF THE WAVE FUNCTIONS AND ACCELERATION OF THE EXPANSIONS CONVERGENCE

For the traditional physical model of the quantum quartic anharmonic oscillator with the Hamiltonian  $H = \frac{1}{2}(p^2 + x^2) + \lambda x^4$ , which plays a significant role in quantum field theory, elementary particle physics, and nuclear physics, its physical characteristics and properties are comprehensively studied and calculated. The method we propose for studying the model, based on expanding the system's wave function in a complete set of harmonic oscillator eigenfunctions, facilitates a thorough analysis and evaluation of all parameters and features of the corresponding quantum systems. This model is also widely used for studying molecular vibrations, phonon modes in solids, nonlinear optical phenomena, and more. We have calculated and constructed the wave functions of the anharmonic oscillator for

various values of the oscillator coupling constant  $\lambda$ . Furthermore, an improved and modified expansion method, using a generalized optimizing oscillator basis with variable frequency, has also been proposed and studied in detail. This improved method drastically accelerates the convergence of expansions across the entire range of the coupling constant variation, thereby substantially increasing the efficiency of the applied method by allowing calculations with a very small number of expansion basis functions  $N \lesssim 10$ . Consequently, this modified approach provides a practically complete, quite simple, and efficient solution to the problem of the quartic anharmonic oscillator, enabling the relatively easy computation of all its physical properties, including the energies of the ground and excited states, as well as the wave functions of these states, for any values of the coupling constant.

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

Надійшла / Received 02.09.2024