ЯДЕРНА ФІЗИКА ТА ЕНЕРГЕТИКА / NUCL. PHYS. AT. ENERGY 27 (2026) 125-141 ISSN 1818-331X

В. А. Бабенко*

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

*Відповідальний автор: pet2@ukr.net

ДОСЛІДЖЕННЯ БІКВАДРАТИЧНОГО АНГАРМОНІЧНОГО ОСЦИЛЯТОРА НА ОСНОВІ НЕЛІНІЙНОГО ВАРІАЦІЙНОГО МЕТОДУ РЕЛЕЯ–РІТЦА. I. РОЗРАХУНОК ТА АНАЛІЗ РІВНІВ ЕНЕРГІЇ ТА ХВИЛЬОВИХ ФУНКЦІЙ

Для квантового біквадратичного ангармонічного осцилятора з гамільтоніаном $H = \frac{1}{2}\left(p^2 + \omega^2 x^2\right) + \lambda x^4$ продовжено наші дослідження його властивостей на основі застосування збіжного розкладу хвильової функції системи за модифікованим осциляторним базисом з варійованою підгінною частотою ω_0, тобто за повним набором власних функцій $\left\{\varphi_n\left(\omega_0; x\right)\right\}$ деякого опорного гармонічного гамільтоніана $\mathscr{H}^{(0)}\left(\omega_0\right) = \frac{1}{2}\left(p^2 + \omega_0^2 x^2\right)$. Даний запропонований нами підхід дає змогу кардинально прискорити збіжність розкладів завдяки додатковій адаптації базисних функцій до структури досліджуваної системи. Основну увагу приділено строгій математичній реалізації варіаційної схеми з оптимізацією частоти базису ω_0 як справжньої нелінійної варіаційної змінної. Розгляд здійснено в рамках узагальненого нелінійного варіаційного методу Релея–Рітца, згідно з яким виконано процедуру мінімізації енергії станів системи за нелінійним параметром ω_0 з метою точного розрахунку його оптимального значення при різних значеннях константи зв'язку осцилятора λ та порядку варіаційного базису *N*. Уперше для даної моделі виконано повну строгу чисельну реалізацію цієї процедури з точним контролем, що дає можливість перейти від евристичного вибору параметрів до строго алгоритмічного та відтворюваного розрахунку. Таке строге варіаційне обґрунтування дає змогу дослідити структуру функціонала енергії та особливості поведінки нелінійного параметра. Показано, що запропонований підхід забезпечує стандартну точність обчислень енергії 10^{-8} при дуже малому порядку базису $N \simeq 6 \div 7$ та зберігає при цьому свою ефективність у всій області сильного зв'язку – при будь-яких λ. Досліджено поведінку оптимізованого частотного параметра ω_0 залежно від порядку базису *N* і виявлено та інтерпретовано важливий ефект варіаційного плато – широкої ділянки зміни параметра ω_0, у межах якої розрахована енергія залишається практично сталою. Далі цим методом розраховано хвильові функції системи для ряду значень λ. Отримані результати демонструють, що нелінійна оптимізація базису є надзвичайно дієвим механізмом значного підвищення ефективності варіаційних розрахунків як для енергій, так і для хвильових функцій.

Ключові слова: ангармонічний осцилятор, гармонічний осциляторний базис, біквадратичний ангармонічний осцилятор, нелінійний варіаційний метод, метод Релея–Рітца, квантова теорія поля.

V. A. Babenko*

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

*Corresponding author: pet2@ukr.net

STUDY OF THE QUARTIC ANHARMONIC OSCILLATOR USING THE NONLINEAR RAYLEIGH–RITZ VARIATIONAL METHOD. I. CALCULATION AND ANALYSIS OF ENERGY LEVELS AND WAVE FUNCTIONS

For the quantum quartic anharmonic oscillator with Hamiltonian $H = \frac{1}{2}\left(p^2 + \omega^2 x^2\right) + \lambda x^4$, our study has been further developed using a convergent expansion of the system's wave function in a modified oscillator basis with an adjustable frequency ω_0, i.e., in the complete set of eigenfunctions $\left\{\varphi_n\left(\omega_0; x\right)\right\}$ of a reference harmonic Hamiltonian $\mathscr{H}^{(0)}\left(\omega_0\right) = \frac{1}{2}\left(p^2 + \omega_0^2 x^2\right)$. Our proposed approach enables a significant improvement in the convergence rate of expansions through the additional adaptation of the basis functions to the specific structure of the system being analyzed. Primary attention is given to the rigorous mathematical implementation of the variational scheme, treating the basis frequency ω_0 as a true nonlinear variational parameter subject to optimization. Within the framework of the generalized nonlinear Rayleigh–Ritz variational method, the system's energy is minimized with respect to the nonlinear parameter ω_0 to accurately determine the optimal value of ω_0 for different values of the oscillator coupling constant λ and the variational basis size N. This study provides, for the first time, a fully rigorous numerical implementation of this procedure for the quartic anharmonic oscillator, ensuring precise control and enabling a transition from heuristic parameter selection to a systematic and reproducible algorithmic approach. This rigorous variational justification enables the exploration of the energy functional's structure and the behavior of the nonlinear parameter. It is shown that the proposed method provides standard 10^{-8} accuracy in energy calculations, employing a remarkably small basis size of $N \simeq 6-7$, while maintaining high efficiency throughout the strong-coupling region – for all values of λ. The behavior of the optimized frequency parameter ω_0 with respect to the basis size N was also investigated, along with the identification and interpretation of the important effect of the variational plateau – a broad region of variation in the parameter ω_0 where the computed energy remains nearly constant. The system's wave functions were also calculated using the proposed method for a range of λ. The obtained results demonstrate that nonlinear optimization of the basis is a highly effective means of substantially increasing the efficiency of variational calculations, both for energies and for the wave functions.

Keywords: anharmonic oscillator, harmonic oscillator basis, quartic anharmonic oscillator, nonlinear variational method, Rayleigh–Ritz method, quantum field theory.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ / REFERENCES

1. C.M. Bender, T.T. Wu. Anharmonic oscillator. Phys. Rev. 184 (1969) 1231.
2. S.N. Biswas et al. Eigenvalues of λx^{2m} anharmonic oscillators. J. Math. Phys. 14 (1973) 1190.
3. F.T. Hioe, E.W. Montroll. Quantum theory of anharmonic oscillators. I. Energy levels of oscillators with positive quartic anharmonicity. J. Math. Phys. 16 (1975) 1945.
4. 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.
5. B. Simon. Large orders and summability of eigenvalue perturbation theory: A mathematical overview. Int. J. Quant. Chem. 21 (1982) 3.
6. А.В. Турбинер. Задача о спектре в квантовой механике и процедура "нелинеаризации". УФН 144 (1984) 35. (Rus) / A.V. Turbiner. The eigenvalue spectrum in quantum mechanics and the nonlinearization procedure. Sov. Phys. Usp. 27 (1984) 668.
7. A.V. Turbiner, A.G. Ushveridze. Anharmonic oscillator: Constructing the strong coupling expansions. J. Math. Phys. 29 (1988) 2053.
8. G.A. Arteca, F.M. Fernández, E.A. Castro. Large Order Perturbation Theory and Summation Methods in Quantum Mechanics (Berlin: Springer-Verlag, 1990) xi, 644 p.
9. B. Simon. Fifty years of eigenvalue perturbation theory. Bull. Am. Math. Soc. 24 (1991) 303.
10. F.M. Fernández, R. Guardiola. Accurate eigenvalues and eigenfunctions for quantum-mechanical anharmonic oscillators. J. Phys. A 26 (1993) 7169.
11. F.M. Fernández, R. Guardiola. The strong coupling expansion for anharmonic oscillators. J. Phys. A 30 (1997) 7187.
12. 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.
13. F.M. Fernández, J. Garcia. Highly accurate calculation of the real and complex eigenvalues of one-dimensional anharmonic oscillators. Acta Polytech. 57 (2017) 391.
14. J.C. del Valle, A.V. Turbiner. Radial anharmonic oscillator: Perturbation theory, new semiclassical expansion, approximating eigenfunctions. I. Generalities, cubic anharmonicity case. Int. J. Mod. Phys. A 34 (2019) 1950143.
15. H. Mutuk. Energy levels of one-dimensional anharmonic oscillator via neural networks. Mod. Phys. Lett. A 34 (2019) 1950088.
16. J.C. del Valle, A.V. Turbiner. Radial anharmonic oscillator: Perturbation theory, new semiclassical expansion, approximating eigenfunctions. II. Quartic and sextic anharmonicity cases. Int. J. Mod. Phys. A 35 (2020) 2050005.
17. P. Okun, K. Burke. Uncommonly accurate energies for the general quartic oscillator. Int. J. Quantum Chem. 121 (2021) e26554.
18. A.V. Turbiner, J.C. del Valle. Comment on: Uncommonly accurate energies for the general quartic oscillator. Int. J. Quantum Chem. 121 (2021) e26766.
19. 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)
20. A.V. Turbiner, J.C. del Valle. Anharmonic oscillator: a solution. J. Phys. A 54 (2021) 295204.
21. V.A. Babenko, N.M. Petrov. On the quartic anharmonic oscillator and the Padé-approximant averaging method. Mod. Phys. Lett. A 37 (2022) 2250172.
22. A.V. Turbiner, J.C. del Valle. From quartic anharmonic oscillator to double well potential. Acta Polytech. 62 (2022) 208.
23. A.V. Turbiner, J.C. del Valle Rosales. Quantum Anharmonic Oscillator (Singapore: World Scientific, 2023) xix, 286 p.
24. 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 (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 (2024) 216. (Ukr)
25. В.А. Бабенко, О.В. Нестеров. Про біквадратичний ангармонічний осцилятор – підхід у рамках розкладу по осциляторному базису. II. Дослідження хвильових функцій і прискорення збіжності розкладів. Ядерна фізика та енергетика 26 (2025) 5. / V.A. Babenko, A.V. Nesterov. The quartic anharmonic oscillator – an oscillator-basis expansion approach. II. Study of the wave functions and acceleration of the expansions convergence. Nucl. Phys. At. Energy 26 (2025) 5. (Ukr)
26. А.С. Давыдов. Квантовая механика (Москва: Наука, 1973) 704 с. (Rus) / A.S. Davydov. Quantum Mechanics (Oxford: Pergamon Press, 1976) xiii, 637 p.
27. S.T. Epstein. The Variation Method in Quantum Chemistry (New York: Academic Press, 1974) ix, 276 p.
28. R.K. Nesbet. Variational Principles and Methods in Theoretical Physics and Chemistry (Cambridge: Cambridge University Press, 2003) xiv, 229 p.
29. N. Zettili. Quantum Mechanics: Concepts and Applications. 3rd ed. (Chichester: Wiley, 2022) xx, 1001 p.
30. A.W. Leissa. The historical bases of the Rayleigh and Ritz methods. J. Sound Vib. 287 (2005) 961.
31. R.N. Hill. Dependence of the rate of convergence of the Rayleigh–Ritz method on a nonlinear parameter. Phys. Rev. A 51 (1995) 4433.
32. I. Alexandrov, S.A. Moszkowski, C.W. Wong. Lowest-order constrained variational method for simple many-fermion systems. Nucl. Phys. A 252 (1975) 13.
33. F.A. de Saavedra, E. Buendía. Variational and norm criteria in high-order perturbative-variational wavefunctions. J. Phys. A 22 (1989) 1933.
34. C. Semay, B. Silvestre-Brac, I.M. Narodetskii. Auxiliary fields and hadron dynamics. Phys. Rev. D 69 (2004) 014003.
35. G. De Gregorio et al. Spectroscopic properties of ^{4}He within a multiphonon approach. Phys. Rev. C 105 (2022) 024326.
36. H.E. Kristiansen et al. Configuration weights in coupled-cluster theory. J. Phys. Chem. A 129 (2025) 2638.
37. P.M. Stevenson. Optimized perturbation theory. Phys. Rev. D 23 (1981) 2916.
38. P.M. Stevenson. Renormalized Perturbation Theory and its Optimization by the Principle of Minimal Sensitivity (Singapore: World Scientific, 2022) viii, 288 p.
39. R. McWeeny, C.A. Coulson. Quantum mechanics of the anharmonic oscillator. Math. Proc. Cambridge 44 (1948) 413.
40. C. Schwartz. A study of some approximation schemes in quantum mechanics. Ann. Phys. 32 (1965) 277.
41. W.E. Caswell. Accurate energy levels for the anharmonic oscillator and a summable series for the double-well potential in perturbation theory. Ann. Phys. 123 (1979) 153.
42. R. Balsa et al. Simple procedure to compute accurate energy levels of a double-well anharmonic oscillator. Phys. Rev. D 28 (1983) 1945.
43. C.-S. Hsue, J.L. Chern. Two-step approach to one-dimensional anharmonic oscillators. Phys. Rev. D 29 (1984) 643.
44. R.M. Quick, H.G. Miller. Comment on “Simple procedure to calculate accurate energy levels of a double-well anharmonic oscillator”. Phys. Rev. D 31 (1985) 2682.
45. R.N. Chaudhuri, M. Mondal. Hill determinant method with a variational parameter. Phys. Rev. A 40 (1989) 6080.
46. R.F. Bishop et al. Paths to optimization in the multistate Rayleigh–Ritz variational method: Applications to the double-well quantum anharmonic oscillator. Phys. Rev. A 40 (1989) 6154.
47. R.N. Chaudhuri, M. Mondal. Improved Hill determinant method: General approach to the solution of quantum anharmonic oscillators. Phys. Rev. A 43 (1991) 3241.
48. J.P. Killingbeck, T. Scott, B. Rath. A matrix method for power series potentials. J. Phys. A 33 (2000) 6999.
49. M. Jafarpour, D. Afshar. Calculation of energy eigenvalues for the quantum anharmonic oscillator with a polynomial potential. J. Phys. A 35 (2002) 87.
50. E. Van der Straeten, J. Naudts. The quantum double-well anharmonic oscillator in an external field. J. Phys. A 39 (2006) 933.
51. P. Kościk, A. Okopińska. The optimized Rayleigh–Ritz scheme for determining the quantum-mechanical spectrum. J. Phys. A 40 (2007) 10851.
52. W.-F. Lu, C.K. Kim, K. Nahm. The multistate Rayleigh–Ritz variational method with the principle of minimal sensitivity for anharmonic oscillators. J. Phys. A 40 (2007) 14457.
53. P. Pedram. Anharmonic oscillator and the optimized basis expansion. Appl. Math. Comput. 219 (2013) 4655.

Надійшла / Received 28.01.2026