第28卷第4期 上海师范大学学报(自然科学版) Vol 28, No. 4
1999年12月 J. of Shanghai Teachers Univ. (Natural Sciences) Dec. 1999

# 球四次非谐振子能谱的Feldman解

张志民, 朱玉祥, 卢书城

(上海师范大学 理工信息学院, 上海 200234)

**摘 要**: 在WKB近似的框架内, 将Feldman提出的应用于幂次势场的高精度计算方法用于分析各向同性四次非谐振子的能谱, 并将计算结果与其他方法进行比较.

**关键词**: 球四次非谐振子; 能谱; Feldman方法

**中图分类号**: O413.1 **文献标识码**: A **文章编号**: 1000-5137(1999)04-0036-06

## 0 引 言

由于在统计力学和场论的许多问题中, 需将各向同性非谐振子(球非谐振子)作为物理模型, 在过去的十余年中, 人们曾采取各种方法对该振子的能谱进行分析和计算[1~4]. WKB近似本以明快见长, 但对球非谐振子的量子化条件式进行严格求积, 导致了用多种椭圆函数表示的非常复杂的结果[5]. 结果复杂会对计算产生不利的影响, 关于这点, 文[6]以一维四次非谐振子为例作了说明.

实际上, 在WKB框架中, Feldman针对各向同性幂次势场, 曾提出过一种计算能级的方法[7], 这种方法精度较高, 且计算程序程式化. 因此, 本文拟推广此法到非幂次势场, 用以计算球非谐振子的非$s$态能级; 而对$s$态, 由于必需的原因, 直接采用文[6]提供的计算公式. 在将计算值与准确值比较后, 再对所得的结果进行简要的讨论.

## 1 计算公式

### 1.1 非s态

球非谐振子的径向波动方程为

$$\left[-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2+g r^4+\frac{l(l+1)}{2\mu r^2}\right]u=\epsilon u. \tag{1}$$

**收稿日期**: 1999-07-07

**作者简介**: 张志民(1977-), 男, 上海师范大学理工信息学院95级本科学生. 卢书城(1941-), 男, 上海师范大学理工信息学院教授.

若记 $\hbar = \mu = 1$, 则 WKB 的量子化条件式

$$\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{2\epsilon - \omega^2 r^2 - 2g r^4 - \frac{(l+\frac{1}{2})^2}{r^2}}\,\mathrm{d}r = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi,\quad (n = 0, 1, 2, \cdots),$$

再记

$$L \equiv l + \frac{1}{2},\quad N \equiv 2n + 1, \tag{2}$$

作变量代换 $y \equiv r^2$, 上式改写为

$$\int_{y_1}^{y_2}\sqrt{Q}\,\mathrm{d}y/y = N\pi. \tag{3}$$

其中

$$Q = 2\epsilon y - \omega^2 y^2 - 2g y^3 - L^3. \tag{4}$$

下面, 用 Feldman 法的标准步骤来改造成(3), 使之成为可资计算的表达式.

第一步, 先会 $\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}y} = 0$, 得到 $Q$ 取极大值时 $y$ 的位置:

$$\bar{y} = \frac{1}{6g}\left(-\omega^2 + \sqrt{\omega^4 + 12g\epsilon}\right), \tag{5}$$

然后再将 $\bar{y}$ 代回式(4), 并令 $Q = 0$, 求出相应的 $L$ 的极大值

$$\bar{L} = \left[\frac{4\epsilon\bar{y} - \omega^2\bar{y}^2}{3}\right]^{1/2}, \tag{6}$$

不难看出, 当 $L = \bar{L}$ 时 $Q = 0$, 相应的经典回转点 $y_1, y_2 \to \bar{y}$.

第二步, 引进无量纲的量

$$x \equiv \ln\left(\frac{y}{\bar{y}}\right),\quad \eta \equiv \frac{L}{\bar{L}}, \tag{7}$$

根据以上分析可知, 当 $\eta \to 1$ 时, 应有 $x_1, x_2 \to 0$. 由式(7), 式(3)表示为:

$$\frac{1}{2}\bar{L}\oint f^{1/2}(x, \eta)\,\mathrm{d}x = N\pi, \tag{8}$$

其中

$$f(x, \eta) \equiv 2\epsilon\left(\frac{\bar{y}}{\bar{L}^2}\right)e^x - \omega^2\left(\frac{\bar{y}}{\bar{L}}\right)^2 e^{2x} - 2g\left(\frac{\bar{y}^3}{\bar{L}^2}\right)e^{3x} - \eta^2, \tag{9}$$

而围道积分在实轴上围绕相应的经典回转点 $x_1, x_2$ 沿顺时针方向进行.

第三步, 为简洁, 记 $F(\eta) \equiv \frac{1}{2}\oint f^{1/2}(x, \eta)\,\mathrm{d}x$, 并将 $F(\eta)$ 在 $\eta = 1$ 点上作幂展开, 有

$$\bar{L}F(\eta) = \bar{L}\sum_{\alpha=0}^{\infty}\frac{F^{(\alpha)}(1)}{\alpha!}(\eta - 1)^\alpha = N\pi. \tag{10}$$

考虑到 $\alpha = 0$ 时 $F(1) = 0$, 需要进一步计算的是 $\alpha \neq 0$ 时 $F^{(\alpha)}(1)$ 的表达式. 应用将函数对 $\eta$ 求导变换为对 $\eta^2$ 求导的公式

$$\left(\frac{\partial}{\partial\eta}\right)^\alpha F(\eta)\Big|_{\eta=1} = 2\alpha!\sum_{\beta=1}^{\alpha}\frac{2^{2\beta-\alpha-1}}{(2\beta-\alpha)!\,(\alpha-\beta)!}\left(\frac{\partial}{\partial\eta^2}\right)^\beta F(\eta)\Big|_{\eta=1},$$

有

$$\frac{F^{(\alpha)}(1)}{\alpha!}=2\sum_{\beta=1}^{\alpha}\frac{2^{2\beta-\alpha-1}}{(2\beta-\alpha)!(\alpha-\beta)!}\frac{1}{2}\oint\left(\frac{\partial}{\partial\eta}\right)^{\beta}f^{1/2}(x,\eta)\mathrm{d}x\Big|_{\eta=1},\tag{11}$$

**再据计算公式**

$$\left(\frac{\partial}{\partial\eta}\right)f^{1/2}(x,\eta)=-\frac{\Gamma(\beta-\frac{1}{2})}{2\sqrt{\pi}}f^{1/2-\beta}(x,\eta);$$

**并注意到** $f^{1/2-\beta}(x,1)$ **以** $x=0$ **为极点, 阶数是** $2\beta-1$ **阶, 可用留数定理求出**

$$\oint f^{1/2-\beta}(x,\eta)\mathrm{d}x\Big|_{\eta=1}=-2\pi i\frac{1}{(2\beta-2)!}\left[\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^{2\beta-2}\left(\frac{x^2}{f(x,1)}\right)^{\beta-1/2}\right]_{x=0},\tag{12}$$

**遂有**

$$\frac{F^{(\alpha)}(1)}{\alpha!}=\sum_{\beta=1}^{\alpha}\frac{2^{2\beta-\alpha-1}(-)^{\beta}\sqrt{\pi}\,\Gamma(\beta-\frac{1}{2})}{(2\beta-\alpha)!(\alpha-\beta)!(2\beta-2)!}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^{2\beta-2}z^{1/2-\beta}(x)\Big|_{x=0},\tag{13}$$

**式中**

$$z(x)\equiv-\frac{f(x,1)}{x^2}.\tag{14}$$

**第四步, 完成计算公式, 记**

$$\alpha_{\alpha\beta}\equiv\frac{2^{2\beta-\alpha-1}(-)^{\beta}\sqrt{\pi}\,\Gamma(\beta-\frac{1}{2})}{(2\beta-\alpha)!(\alpha-\beta)!(2\beta-2)!}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^{2\beta-2}z^{1/2-\beta}(x)\Big|_{x=0},\tag{15}$$

**其中** $z(x)$ **各阶导数在** $x=0$ **处的通式可由式**(9)**算出**($n=0,1,2,\cdots$):

$$z^{(n)}(0)=\left(\frac{\bar{y}}{L}\right)^2\frac{2}{(n+1)(n+2)}\left(3^{n+2}g\bar{y}+2^{n+1}\omega^2-\frac{\epsilon}{\bar{y}}\right).\tag{16}$$

**再简记**

$$\alpha_{\alpha}\equiv\sum_{\alpha=1}^{\infty}\alpha_{\alpha\beta},\tag{17}$$

**从式**(13)(10), **可得到** $\bar{L}$ **所满足的方程**:

$$\bar{y}\sum_{\alpha=1}^{\infty}\left(\frac{L-\bar{L}}{\bar{L}}\right)^{\alpha}\alpha_{\alpha}=N\pi,\tag{18}$$

**上式和** $\bar{L}$ **的定义式**(6)**就是我们计算非** $s$ **态能级的基础. 实际上, 由于式**(18)**随着** $\alpha$ **的增大为一渐近级数, 在具体计算时用最佳化**(optimum)**方法**[8]**取** $\alpha$ **到** 5.

**1.2　s 态**

**在文**[7]**中** Feldman **指出, 非** $s$ **态的量子条件式在取** $l=0$ **时, 并不与** $s$ **态的量子化条件式对等, 除非势场具有** $\frac{1}{r}$ **或** $r^2$ **的形式. 所以计算球非谐振子的** $s$ **态能谱应直接从** $s$ **态的量子化条件出发. 考虑到在球对称势场中** $s$ **态能级与一维系统奇宇称能级之间的相似性, 只需将文**[6]**用以计算四次非谐振子的结果略加改造, 即可得到球非谐振子** $s$ **态能级的计算式**:

$$F\left(-\frac{1}{2},\frac{3}{2},2,\frac{\sqrt{\omega^4+16\epsilon g}-\omega^2}{2\sqrt{\omega^4+16\epsilon g}}\right)=\frac{4g(4n+3)}{(\omega^4+16\epsilon g)^{1/4}\left(\sqrt{\omega^4+16\epsilon g}-\omega^2\right)}.\tag{19}$$

**由于在** $|z|<1$ **的区间, 当** $\gamma\neq$ **零或负整数时** $F(\alpha,\beta,\gamma,z)$ **收敛, 故上式的超几何函数为一解析函数.**

表 1 四次非谐振子能级计算值和准确值以及有关文献的比较

| $dm$ | $\omega$ | $g$ | $l$ | $n$ | 本文 | 准确值* | 文[2] |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 3 | 1 | 0.5 | 0 | 50 | 524.603(523.265) | 524.604 | 524.594 |
| | | | 50 | 25 | 507.037 | 507.068 | 507.065 |
| | | | 100 | 0 | 457.284 | 457.286 | 457.284 |
| | | | 0 | 25 | 213.988(213.479) | 213.991 | 213.986 |
| | | | 20 | 15 | 209.447 | 209.482 | 209.477 |
| | | | 50 | 0 | 187.526 | 187.530 | 18.526 |
| | | | 0 | 5 | 30.0571(30.003) | 30.065 | 30.050 |
| | | | 4 | 3 | 29.493 | 29.510 | 29.497 |
| | | | 10 | 0 | 27.083 | 27.092 | 27.083 |
| | | | 0 | 0 | 2.29628(2.274) | 2.324 | 2.275 |
| 3 | 0 | 1 | 1 | 0 | 4.436763 | 4.478039 | |
| | | | 2 | 0 | 6.799768 | 6.830308 | |
| | | | 1 | 2 | 16.561747 | 16.599521 | |
| | | | 3 | 1 | 16.022322 | 16.046193 | |
| | | | 5 | 0 | 15.063344 | 15.06345 | |
| | | | 4 | 3 | 34.956730 | 34.980152 | 34.963 |
| | | | 10 | 0 | 31.678774 | 31.690628 | 31.679 |
| | | | 20 | 15 | 257.841309 | 257.889588 | 257.883 |
| | | | 50 | 0 | 229.43306 | 229.437335 | 229.433 |
| 3 | 0 | 1 | 0 | 0 | 2.36356(2.325898) | 2.393644 | 2.327 |
| | | | 0 | 1 | 7.3148(7.285011) | 7.335730 | |
| | | | 0 | 5 | 35.7308(35.642609) | 35.740315 | 35.721 |
| | | | 0 | 25 | 263.747(263.038361) | 263.750919 | 263.744 |
| | | | 0 | 50 | 651.728(649.934631) | 651.731 | 651.718 |
| 2 | 0 | 1 | 1 | 0 | 3.347203 | 3.398150 | |
| | | | 2 | 0 | 5.589356 | 5.624339 | |
| | | | 1 | 2 | 14.933599 | 14.977808 | |
| | | | 3 | 1 | 14.482673 | 14.508675 | |
| | | | 5 | 0 | 13.581392 | 13.600878 | |
| | | | 4 | 3 | 33.041477 | 33.066978 | |
| | | | 10 | 0 | 29.887598 | 29.899842 | |
| | | | 20 | 15 | 254.675674 | 254.725806 | |
| | | | 50 | 0 | 226.480499 | 266.484799 | |
| | | | 0 | 0 | 1.37651(1.372664) | 1.477150 | |
| | | | 0 | 1 | 5.9558(5.938905) | 6.003386 | |
| | | | 0 | 5 | 33.6746(33.5793) | 33.69428 | |
| | | | 0 | 25 | 260.339(259.602692) | 260.345813 | |

* 转引自文[3]

## 2 计算结果

在表 1 中, 作为比较, 分别示出据 Feldman 法($l\neq 0$)与文[5]($l=0$)得到的计算结果, 文[2]的计算值和准确值. 在本文的计算值中, 用 Feldman 法得到的非 $s$ 态公式令 $l=0$ 所得的结果列在括弧里. $dm$ 为四次非谐振子的维数, 对于 2, 3 维的振子, 只要在计算式中改 $l+\frac{1}{2}\to l+\frac{dm-2}{2}$, 并分别代以 2, 3 即可.

## 3 讨论与结语

(1) 本文将 Feldman 法推广到球四次非谐振子非 $s$ 态能量的计算中去, 最后得到能量计算式

$$\bar{L}\sum_{\alpha=1}^{\infty}\left(\frac{L-\bar{L}}{\bar{L}}\alpha_{\alpha}\right)=N\pi$$

是关于 $e$ 的隐函数表示式.

过去关于球四次非谐振子的工作, 大都是通过各种数学手段, 力求将 $e$ 写成显函数的形式. 这种方法对于讨论各个参量对能谱的影响, 无疑是有利的; 但是复杂是其共同的缺陷. 在有些文章中, 正如文[6]所指出的, 复杂还引入了一些差池.

随着计算机技术的迅速发展, 越来越多的理论计算工作可借助于数值计算来进行. 本文选择球四次非谐振子的能谱作为对象, 采用 C 语言编程, 给所要求的物理量赋一个初值, 代入计算公式, 然后在设定精确度的情况下进行循环, 逐渐逼近, 以获得一个计算结果. 为了检验所用方法的准确性, 将用 Feldman 法求出的值与用椭圆函数的 WKB 近似求得的值[2]一同列在表 1 中进行比较, 分别计算了 $\omega=0$(pure quartic oscillator)和 $\omega=1$(非谐振子)的值, 比较后发现我们的工作与准确值符合得很好. 利用新型计算机高速、精确的优点, 如果计算方法成熟或得当, 可以为解决复杂的实际问题提供一条快捷的途径.

(2) 本文的工作再一次证实了: 在用 WKB 近似法时, $s$ 态的能量不应在求出非 $s$ 态计算公式的基础上以 $l=0$ 代入而获得. 虽然这一点在 1979 年已由 Feldman 指出, 但在现在很多的文章中, 仍在沿用此法(比如本文的有些引文). 从表 1 中可见, 对 $s$ 态, 参考文[6]的解法得到的 $s$ 态的能量值与准确值比较, 均方根偏差为 0.0343; 而用 Feldman 法得到的非 $s$ 态公式令 $l=0$ 所得的结果, 均方根偏差则为 0.7013.

## 参考文献:

[1] Mathews P M, et al. Energy eigenvalues of quartic oscillator in $d\leq 3$ dimensions[J]. J Phys A: Math Gen, 1982, 15: 103.

[2] Seetharaman M, et al. Analytic WKB energy expressions for three-dimensional anharmonic oscillators[J]. J Phys A: Math Gen, 1982, 15: 1537.

[3] Vasan S S, et al. Higher-order JWKB approximations for radial problems (Ⅱ) [J]. The quartic oscillator. J Phys A: Math Gen, 1984, 17: 2493.

[4] Yukalova E P, et al. Spherical anharmonic oscillator in self-similar approximation[J]. J Phys A: Math Gen, 1993, 26: 2011.

[5] Sanchez A M, et al. Quantum anharmonic symmetrical oscillator using elliptic function[J]. J Phys A: Math Gen, 1986, 19: 887.

[6] 卢书城. 四次非谐振子能级的超几何函数解[J]. 上海师范大学学报(自然科学版), 1999, 28(1): 32 - 38.

[7] Feldman G, et al. Energy levels and ordering in the WKB approximation[J]. Nucl Phys B, 1979, 154: 441.

[8] Migdal A B. Qualitative Methods in quantum theory[J]. Massachusetts: Benjamin W A Inc., 1979.

# Energy Spectra of Spherical Anharmonic Oscillator Using Feldman Method

ZHANG Zhi-min, ZHU Yu-xiang, LU Shu-cheng

(College of Science and Information Technology, Shanghai Teachers University, Shanghai, 200234, China)

**Abstract**: In the framework of the WKB approximation, the energy levels of spherical anharmonic oscillator are calculated by using the Feldman method. The results are compared with the corresponding references.

**Key words**: spherical anharmonic oscillator; energy spectra; Feldman method