

**сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна**

P11-85-920

Р.М.Ямалеев

**ВЫЧИСЛЕНИЕ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ,
ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ, ПЛОТНОСТИ
И СРЕДНЕКВАДРАТИЧНЫХ РАДИУСОВ ЯДЕР
МЕТОДОМ РАЗЛОЖЕНИЯ
ПО ГИПЕРСФЕРИЧЕСКИМ ФУНКЦИЯМ
(ПРОГРАММА НА ФОРТРАНЕ)**

1985

1. Метод гиперсферических функций

В методе гиперсферических функций (сокращено Г-Ф) волновые функции и энергии связи ядер, состоящих из A нуклонов, находятся путем разложения решения $3(A-1)$ -мерного уравнения Шредингера в базисе ГФ функции [1]. Соответственно, $3(A-1)$ -мерный оператор Лапласа записывается в переменных гиперсферических углов $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n-1}$ и коллективной переменной ρ - радиуса гиперсферы. В ГФ-переменных оператор Лапласа принимает вид

$$\Delta_n \equiv \sum_n \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} \equiv \frac{1}{\rho^{n-1}} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^{n-1} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \Delta_{\Omega_n}, \quad (I.1)$$

где угловая часть оператора Δ_{Ω_n} находится по рекуррентной формуле

$$\Delta_{\Omega_n} = \frac{1}{\sin^{n-2} \theta_{n-1}} \frac{\partial}{\partial \theta_{n-1}} \left(\sin^{n-2} \theta_{n-1} \frac{\partial}{\partial \theta_{n-1}} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta_{n-1}} \Delta_{\Omega_{n-1}}. \quad (I.2)$$

Гиперсферические гармоники являются собственными функциями угловой части оператора Лапласа:

$$\Delta_{\Omega_n} Y_{K\gamma}(\theta_i) = -K(K-n-2) Y_{K\gamma}(\theta_i). \quad (I.3)$$

Волновая функция A нуклонов ищется в виде

$$\Psi(1, 2, \dots, A) = \rho^{-(3A-4)/2} \sum_{K\gamma} \chi_{K\gamma}(\rho) Y_{K\gamma}(\theta_i), \quad (I.4)$$

где

$$\int \chi_{K\gamma}^2(\rho) d\rho = 1, \quad \gamma \in LST. \quad (I.5)$$

Подставляя (I.4) в многомерное уравнение Шредингера с оператором (I.1), выделяя угловую часть решения (I.3), получим систему дифференциальных уравнений для определения радиальных собственных функций и собственных значений:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{L_K(L_K+1)}{\rho^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (E + W_{K\gamma}^{K\gamma'}) \right) \chi_{K\gamma}(\rho) = \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{K'\gamma' \neq K\gamma} W_{K\gamma}^{K'\gamma'} \chi_{K'\gamma'}(\rho), \quad (I.6)$$

где $L_K = K + \frac{1}{2}(3A-6)$, $W_{K\gamma}^{K'\gamma'}(\rho)$ - матричные элементы, которые выражаются через двухчастичный потенциал [2]:

$$W_{K\gamma}^{K'\gamma'}(\rho) = \langle AK[\bar{r}] \in \Delta ST M_2 M_s M_H \bar{V} | AK[\bar{r}] \in \Delta S'T' M_s M_H M_H \rangle. \quad (I.7)$$

Вычисление матричных элементов (I.7) существенно облегчается, если ограничиться только первыми членами разложения (I.4), т.е. в приближении $K = K_{min}$ и $K = K_{min} + 1$. Как показано в [3], в этом приближении матричные элементы от двухчастичного потенциала могут быть вычислены с использованием результатов оболочечной теории, в которых известные интегралы Талми I_K заменяются на функции

$$I_K = \int \exp(-z^2/z_0^2) z^{K+2} V(z) dz. \quad (I.8)$$

Матричные элементы (I.7) в этом случае принимают вид

$$\langle AK[\bar{r}] \in \Delta ST | V | AK[\bar{r}] \in \Delta ST \rangle = \sum_K I_K(\rho) Q_K, \quad (I.9)$$

где

$$I_K(\rho) = N_K \int_0^1 (1-z)^{K-k+1/2} z^{k+3/2} V(\rho\sqrt{z}) dz, \quad (I.10)$$

$$N_K = \Gamma(K+3/2, A-3/2) / [\Gamma(K-k+3/2) \Gamma(K+3/2)], \quad (I.11)$$

$$\rho_{A-2} = \rho \sin \theta, \quad z_{A-1, A} = \rho \cos \theta, \quad \bar{z} = \cos^2 \theta, \quad 1 - \bar{z}^2 = \sin^2 \theta.$$

Методы, развитые в модели оболочек, в принципе можно перенести и обобщить на случай метода K -гармоник. Особенно эффективен оболочечный подход для приближенных вычислений потенциалов $W_K^{\bar{K}}(\rho)$ по методу Базя-Букова-Суркова [2]. Этот метод является асимптотическим и может давать аккуратные результаты лишь при достаточно больших массовых числах A .

Согласно этому подходу,

$$\langle \delta^4 \rho^{A-4} [\bar{r}] \in \Delta ST | V | \delta^4 \rho^{A-4} [\bar{r}] \in \Delta S'T' \rangle \equiv \quad (I.12)$$

$$\equiv V_{[\bar{r}] \in \Delta S'T'}^{[\bar{r}] \in \Delta ST}(\rho_0) = \text{const} \int d\rho \rho^{3A-4+2K} \exp(-\rho^2/\rho_0^2) W_{K[\bar{r}] \in \Delta ST}^{\bar{K}[\bar{r}] \in \Delta S'T'}(\rho).$$

Если представить интеграл в правой части этой формулы в виде

$$\int d\rho W_{K_i}^{\bar{K}_i}(\rho) \exp(3A-4+2K) \left(\ln(\rho/\rho_0) - \frac{\rho^2}{(3A-4+2K)\rho_0^2} \right) \quad (I.13)$$

и вычислить его по методу Лапласа [4], в приближении высокими степенями по $(3A-4+2K)^{-1}$ получится, что

$$V_{[\bar{r}] \in \Delta S'T'}^{[\bar{r}] \in \Delta ST}(\rho_0) = W_{K[\bar{r}] \in \Delta S'T'}^{\bar{K}[\bar{r}] \in \Delta ST}(\rho_0 \sqrt{K+3A-4}). \quad (I.14)$$

Таким образом, чтобы получить приближенные значения потенциала W в точке ρ , достаточно вычислить оболочечный матричный элемент при значении оболочечного параметра

$$\rho_0 = \frac{\rho}{\sqrt{K+(3A-4)/2}}. \quad (I.15)$$

В развитом подходе матричные элементы плотности определяются формулой

$$n_{ij}(z) = \frac{16}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma((5A-11)/2)}{\Gamma((5A-14)/2)} \times$$

$$\times \int_0^{\infty} (\rho^2 - z^2)^{(5A-16)/2} \rho^{-(5A-13)} \chi_i(\rho) \chi_j(\rho) +$$

$$+ \frac{8(A-4)}{3\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma((5A-11)/2)}{\Gamma((5A-16)/2)} \int_0^{\infty} z^2 (\rho^2 - z^2)^{(5A-15)/2} \rho^{-(5A-12)} \chi_i(\rho) \chi_j(\rho). \quad (I.16)$$

Среднеквадратичные радиусы определяются через диагональные матричные элементы плотности:

$$\bar{R}_{ii}^2 = \langle r_{ii}^2 \rangle = \int n_{ii}(z) z^4 dz \left(\int n_{ii}(z) z^2 dz \right)^{-1}, \quad (I.17)$$

где плотности нормированы по формуле

$$4\pi \int n_{ii}(z) z^2 dz = A. \quad (I.18)$$

2. Метод решения радиального уравнения Шредингера

Как было показано в предыдущем параграфе, формализм ГФ сводит исходную задачу решения многомерного уравнения Шредингера к решению

одномерной (радиальной) системы связанных дифференциальных уравнений (I.6) на собственные значения. Метод решения подобных задач, используемый в данной программе, описан в [5,6]. Здесь изложим краткое содержание применяемого метода.

Задача определения собственных значений

$$\lambda_n = \frac{2m}{\hbar^2} E_n \quad (2.1)$$

и собственных функций $\chi_{\kappa\lambda}^{(n)}(\rho)$ является нелинейной, поскольку иско-
мые величины входят в уравнение (I.6) в билинейном соотношении.
Поэтому, как правило, для решения задачи на собственные значения
применяются итерационные методы. В настоящей программе реализован
непрерывный аналог известного метода Ньютона [7]. Применением этого
метода решение нелинейного уравнения

$$\Phi(y) = 0 \quad (2.2)$$

сводится к решению эволюционного уравнения

$$\frac{d\Phi}{dt} = -\Phi \quad (2.3)$$

методом Эйлера.

Запишем уравнение (I.6) в следующем виде:

$$y_i'' + (\lambda) y_i + \sum_{j=1}^N W_{ij} y_j = 0, \quad (2.4)$$

$$\sum_i \int y_i^2 - 1 = 0,$$

$$y_i(0) = 0, \quad y_i(\infty) = 0.$$

Преобразуя (2.4) в эволюционную задачу, согласно (2.3), получим:

$$v_{oi}'' + \lambda v_{oi} + \sum_{j=1}^N W_{ij} v_{oj} = - (y_i'' + \lambda y_i + \sum_{j=1}^N W_{ij} y_j), \quad v_{oi}(0) = 0, \quad v_{oi}(\infty) = 0. \quad (2.5)$$

$$v_{ii}'' + \lambda v_{ii} + \sum_{j=1}^N W_{ij} v_{ij} = -y_i, \quad v_{ii}(0) = 0, \quad v_{ii}(\infty) = 0. \quad (2.6)$$

$$v_{oi} + \mu v_{oi}' = \frac{dy_i}{dt}, \quad \mu = \frac{d\lambda}{dt}, \quad (2.7)$$

$$2 \int y_i v_{oi} + \mu 2 \int y_i v_{ii} = - \left\{ \int y_i^2 - 1 \right\}. \quad (2.8)$$

Если заданы начальные приближения (λ_0, y_{oi}) из области сходимости
данного итерационного процесса, то сходимость итерационного процесса
обеспечена, и при увеличении числа N мы имеем

$$(\lambda^{(N)}, y_i^{(N)})_{N \rightarrow \infty} \rightarrow (\lambda^*, y_i^*),$$

где (λ^*, y_i^*) есть решение исходной задачи.

Таким образом, приближенное решение на N -й итерации строит-
ся из решения неоднородных краевых задач (2.5)-(2.6) и из решения,
найденного на $(N-1)$ -й итерации. Решая краевые задачи (2.5)-(2.6),
находим v_{oi}' , v_{ii}' , причем $v_{oi}' = -y_i$. Далее, подставляя полученные
решения в (2.7), определяем μ . Из (2.7) находим

$$y_N = y_{N-1} + \tau (v_{oi}' + \mu v_{ii}'). \quad (2.9)$$

Для решения (2.6) в программе применяется метод прогонки [8].

Выбор начальных собственных значений и собственных функций

Алгоритм вычисления начальных собственных значений основан на
методе, описанном в [9]. Суть этого метода состоит в вычислении оп-
ределителя трехдиагональной матрицы, получающейся при конечно-раз-
ностной аппроксимации исходного уравнения. Нули определителя соответ-
ствуют приближенным собственным значениям уравнения (2.4). Приближен-
ные волновые функции вычисляются методом прогонки путем добавления
в правые части (2.4) произвольной константы $C \ll 1$. В настоящей ра-
боте полагается $C = 0,1$.

3. Описание структуры программы

Настоящая программа написана на языке FORTRAN, что позволя-
ет использовать ее на ЭВМ, имеющих соответствующее математическое
обеспечение. Программа состоит из следующих основных подпрограмм:

GARMON - основная программа, где осуществляется ввод ис-
ходной информации и в соответствии с ней организуется режим работы
подпрограмм, обеспечивающих решение заданного варианта задачи.

VELD - в этой подпрограмме вычисляется потенциал в задан-

ной точке, с заданной точностью. Потенциал находится в результате интегрирования методом Гаусса (для этой цели используется библиотечная программа *KGauss*) функции, вычисляемой в подпрограмме - функции *AINTE*.

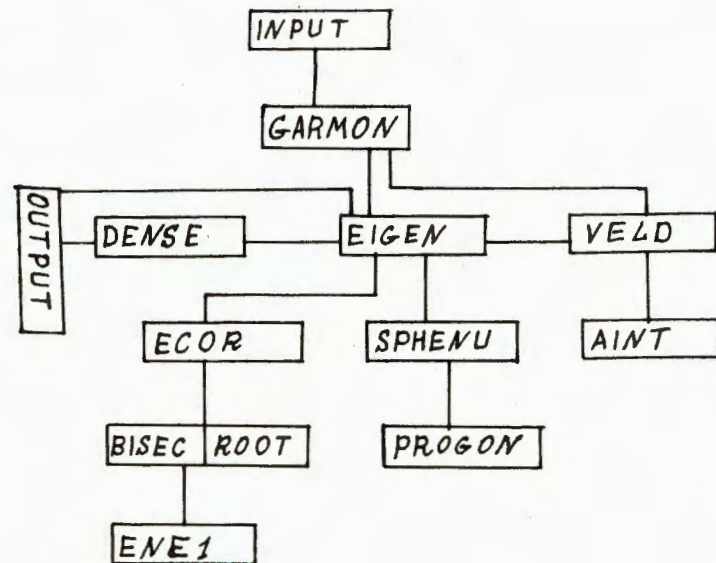
ECOR - в этой подпрограмме вычисляются начальные собственные значения для связанных состояний. Для вычисления определителя, соответствующего конечно-разностной аппроксимации второго порядка уравнения (2.4), вызывается подпрограмма - функция *EME1*. Корни функции находятся с помощью подпрограмм *BISEC* и *ROOT* методом деления отрезка пополам.

SPHENU - в этой подпрограмме вычисляются пробные волновые функции для соответствующих пробных собственных значений и реализована итерационная процедура на основе непрерывного аналога метода Ньютона для решения уравнения (2.4).

PROGON - подпрограмма, реализующая метод прогонки, для решения линейной краевой задачи.

DENSE - в этой подпрограмме вычисляются матричные элементы плотности и среднеквадратичные радиусы по формулам (I.16)-(I.18).

Структурная блок-схема программы приведена на рисунке.



Приложение

Описание контрольного варианта.

I. Исходные данные

В качестве контрольного варианта выбран расчет энергии, волновых функций, матричных элементов плотности и среднеквадратичных радиусов ядра гелия $A=4$ с параметрами потенциала [9]

$$NM1 = 0.4864, NM2 = -0.529, V1 = -140.6,$$

$$V2 = 389.5, RH1 = 1.4, RH2 = 0.7.$$

$$K = 0.$$

Массив коэффициентов $BV(I)$ ($I=1, Z$) задается пользователем.

Для $A=4$ $BV(1) = 6.0, BV(Z) = 0, Z=2, \dots, Z$, орбитальный момент определяется по формуле

$$L = K + 1.5 * (A - 2).$$

Шаг интегрирования $H = 0.1$, число шагов интегрирования $M = 200$. Предел интегрирования $R = M * H$. Относительная и абсолютная точности интегрирования $AEP1 = 1E-4, AEP2 = 1E-5$.

Целочисленный параметр IN соответствует интервалу, через который производится печать волновых функций, потенциала и плотности.

Все исходные данные задаются в самом тексте программы.

2. Печать результатов

Печать результатов осуществляется следующим образом:

- 1) печатаются атомный вес, параметры потенциала, величины орбитального момента;
- 2) печатается массив коэффициентов $BV(I), I=1, \dots, Z$;
- 3) печатаются шаг и число точек интегрирования;
- 4) далее идет печать потенциала через $IN = 4$ точек;
- 5) печать пробных собственных значений;
- 6) печатаются значения μ на каждом шаге итерационной процедуры. Абсолютная величина μ является количественной характеристикой вклада от данной итерации к приближенному решению;
- 7) печатаются невязка, волновые функции через IN и значения энергии в единицах MeV ;
- 8) печатаются матричные элементы плотности и среднеквадратичные радиусы.

5. Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. ЖЭТФ, т. 65, № 28, 1973.
6. Bang J., Gareev F.A., Puzynin I.V., Jamalejev R.
Nucl.Phys. 1976, A 261, p.59.
Гареев Ф.А., Пузынина Т.П., Пузынин И.В., Ямалеев Р.М.
ОИЯИ, II-808I, 1974;
Гизаткулов М.Х., Пузынин И.В., Ямалеев Р.М. ОИЯИ, PII-10029,
1976.
7. Мидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. Непрерывный аналог метода Ньютона в нелинейных задачах физики. ЭЧАЯ, т. 4, № 1, 1973, с. 127.
8. Годунов С.К., Рябенский В.С. Введение в теорию разностных схем. Физматгиз, М., 1962.
9. Burov V.V., Dostovalov V.N., Kaschiev M., Shitikova K.V.
J.Phys.G. Nucl.Phys.7, p.131, 1981.

Рукопись поступила в издательский отдел
20 декабря 1985 года.

Ямалеев Р.М.

P11-85-920

Вычисление уровней энергии, волновых функций, плотности и среднеквадратичных радиусов ядер методом разложения по гиперсферическим функциям

Дается описание программы CARMON, написанной на алгоритмическом языке Фортран, для вычисления уровней энергии, волновых функций, матричных элементов плотности и среднеквадратичных радиусов ядер в рамках метода К-гармоник в приближении $K = K_{\min}$. С помощью метода разложения волновой функции по гиперсферическим функциям $3(A - 1)$ -мерное уравнение Шредингера для ядра, состоящего из A нуклонов, сводится к системе дифференциальных уравнений на собственные значения и собственные функции. Для решения полученной билинейной системы применяется непрерывный аналог метода Ньютона. В работе приведены основные расчетные формулы, структурная блок-схема и, в Приложении, контрольный вариант результатов.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Yamaleev R.M.

P11-85-920

Calculation of Energy Levels, Wave Functions, Density and Nuclear RMS Radii by the Method of Expansion over Hyperspherical Functions

CARMON program written in Fortran algorithmic language is described. It is intended for calculating energy levels, wave functions, density matrix elements and nuclear RMS radii by the method of K-harmonics in the $K = K_{\min}$ approximation. Using the method of expansion of wave function over hyperspherical functions, $3(A - 1)$ -dimensional Schroedinger equation for a nucleus consisting of A nucleons reduces to a system of differential equations for eigensolution problem. For solving the obtained bilinear system a continuous analog of the Newton method is used. Basic calculation formulas, structure flowsheet and, in Appendix, control variant of results are given.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985