СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

11 - 9462

Г.С.Казача

ВЫЧИСЛЕНИЕ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ СФЕРИЧЕСКИХ ЯДЕР МЕТОДОМ ПРОГОНКИ

1976

11 - 9462

Г.С.Казача

ВЫЧИСЛЕНИЕ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ СФЕРИЧЕСКИХ ЯДЕР МЕТОДОМ ПРОГОНКИ

В настоящей работе рассматривается вопрос определения конечно-разностным методом собственных значений энергии и собственных функций уравнения Шредингера со сферическим потенциалом

$$\frac{d^2 u}{d x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r))u - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u = 0 . \qquad /1/$$

Собственные функции $u(r)$ удовлетворяют условию нормировки

$$\int_0^{\infty} |u(r)|^2 dr = 1 \qquad /2/$$

и граничному условию

$$u(0) = 0 . \qquad /3/$$

Как известно /1/, наилучшим образом среднее поле ядра описывается потенциалом Саксона-Вудса, содержащим два члена: центральный

$$V_{\text{яд}}(r) = - \frac{V_0^{N,Z}}{1 + \exp[\alpha(r - R_0)]} \qquad /4а/$$

и спин-орбитальный

$$V_{\ell s}(r) = - \eta \frac{1}{r} \frac{d V_{\text{яд}}(r)}{dr} (\ell s) . \qquad /4б/$$

При вычислении уровней протонной системы потенциал среднего поля должен быть дополнен членом кулоновского взаимодействия, который имеет вид

$$V_k(r) = \frac{(z-1)e^2}{r} \begin{cases} \dfrac{3r}{2R_0} - \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{r}{R_0}\right)^3 & r \le R_0 \\ 1 & r > R_0 . \end{cases} \qquad /5/$$

Решению задач, аналогичных задаче /1/-/3/, посвящено немало работ. Применяемые в этих работах методы решения можно разделить на две группы: конечно-разностные методы [2–4] и аналитические, позволяющие получить приближенное решение [5]. В работе [2] задача /1/-/3/ решалась методом стрельбы, который, как известно /см.[6] /, является неустойчивым, и при его применении возникают некоторые трудности. Методы, описанные в работе [3], были разработаны для расчета нейтронных сечений. При решении задач ядерной физики в настоящее время широко используется непрерывный аналог метода Ньютона [4]. Однако непосредственно к вычислению волновых функций сферических ядер он не применялся.

В данной работе задача /1/-/3/ решалась методом прогонки [6]. Применение этого метода при решении задачи на собственные значения для уравнения Орра-Зоммерфельда описано в [7].

2. Метод решения

Для численного решения задачи /1/-/3/ полубесконечный интервал $0 \le r < \infty$ заменяется отрезком $[0, R]$.

При этом граничное условие на правом конце отрезка можно получить из условия непрерывности логарифмической производной собственной функции

$$\frac{u'}{u}\Big|_{r=R} = \frac{\tilde{u}'}{\tilde{u}}\Big|_{r=R}, \qquad /6/$$

где $\tilde{u}(r)$-асимптотическое решение уравнения /1/ в области $r \ge R$. Величина R выбирается таким образом, чтобы при $r \ge R$ можно было пренебречь экспоненциально убывающим потенциалом среднего поля ядра и членом $\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$. В этом случае можно получить асимптотическое решение $\tilde{u}(r)$, удовлетворяющее условию нормировки /2/

$$\tilde{u}(r) = \begin{cases} C\cdot e^{-kr} & \text{для нейтронной системы}, \\ C\cdot e^{-kr}\cdot r^{-\frac{Q}{2R}} & \text{для протонной системы}, \end{cases} \qquad /7/$$

где

$$k = \left(\frac{2m}{\hbar^2}|E|\right)^{1/2}, \quad Q = \frac{2m}{\hbar^2}(z-1)e^2 .$$

С учетом /6/-/7/ уравнение /1/ вместе с граничными условиями приобретает вид

$$u'' - q(r)u + \lambda u = 0 \qquad /8а/$$

$$u(0) = 0 \qquad /8б/$$

$$u'(R) + \kappa(\lambda)u(R) = 0, \qquad /8в/$$

$$\kappa(\lambda) = \begin{cases} k & \text{для нейтронной системы}, \\ k + \frac{Q}{2R}\,\frac{1}{R} & \text{для протонной системы}. \end{cases}$$

Задача /8а/-/8в/ решалась численно методом встречной прогонки от обеих граничных точек со сшивкой во внутренней точке x_0, которая определяется из уравнения

$$q(x_0) = \lambda .$$

Заменяя производные в /8а/ и /8в/ разностными формулами второго порядка аппроксимации, получим две системы разностных уравнений на отрезках $[0, x_0]$ и $[x_0, R]$:

$$\begin{aligned} &u_0 = 0 \\ &u_{i+1} - C_i(\lambda)u_i + u_{i-1} = 0 \quad i = 1,2,\dots M-1, \end{aligned} \qquad /9/$$

где

$$C_i = 2 + h_1^2 (q(r_i) - \lambda), \quad h_1 = \frac{x_0}{M}, \; r_i = h_1 \cdot i,$$

$$u_0 (3 + 2h_2 \kappa) - 4u_1 + u_2 = 0 \qquad /10/$$

$$u_{j+1} - C_j(\lambda) u_j + u_{j-1} = 0 \qquad j = 1, 2, \ldots N-1,$$

$$h_2 = \frac{R - x_0}{N}, \; r_j = R - h_2 j .$$

Прогоночные коэффициенты систем /9/ и /10/ $A_i(\lambda)$ и $B_j(\lambda)$ связывают между собой значения функции $u(r)$ в двух соседних точках

$$u_{i-1} = A_i(\lambda)\, u_i, \quad u_{j-1} = B_j(\lambda)\, u_j \qquad /11/$$

и вычисляются по рекуррентным формулам /6/:

$$A_{i+1} = \frac{1}{C_i - A_i}, \qquad B_{j+1} = \frac{1}{C_j - B_j}. \qquad /12/$$

При этом

$$A_1 = 0, \quad B_1 = \frac{2 - \frac{C}{2}}{1 + h_2 \kappa}.$$

Уравнение для определения собственных значений получается из требования гладкости собственной функции в точке x_0:

$$\frac{u'}{u}\Big|_{r = x_0 - 0} = \frac{u'}{u}\Big|_{r = x_0 + 0}. \qquad /13/$$

Заменяя в /13/ производные разностными формулами и воспользовавшись соотношениями /11/, получим

$$f(\lambda) = \frac{3 - 4A_M(\lambda) + A_M(\lambda) A_{M-1}(\lambda)}{h_1} + \frac{3 - 4B_N(\lambda) + B_N(\lambda) B_{N-1}(\lambda)}{h_2} = 0 .$$

Таким образом, задача нахождения собственных значений уравнения /8а/ с граничными условиями /8б/, /8в/ сводится к нахождению нулей функции $f(\lambda)$.

Функция $f(\lambda)$ вычисляется в точках $\lambda_i = h_\lambda i$. После выделения отрезков $[\lambda_i, \lambda_{i+1}]$, на которых функция меняет знак, собственные значения находятся методом деления отрезка пополам.

Когда собственное значение известно, собственную функцию можно получить, осуществив обратную прогонку по формулам /11/.

Вопросы точности разностного метода решения задачи на собственные значения рассматривались А.Н.Тихоновым и А.А.Самарским /9/. Как известно, разностная схема /9/ имеет второй порядок точности, т.е. абсолютная ошибка убывает как h^2.

3. Реализация алгоритма на ЭВМ

Предлагаемый алгоритм был реализован в виде программы, написанной на языке FORTRAN. Время вычисления всех протонных или нейтронных уровней энергии и соответствующих им волновых функций для одного ядра при шаге $h = \frac{R}{400} (R = 3R_0)$ не превышает 2 *мин* на ЭВМ CDC-6400. Абсолютная погрешность при этом составляет для собственных значений энергии величину меньше 0,01 *МэВ*.

Для проверки точности метода задача /8а/-/8в/ была также решена на отрезке для случая прямоугольного потенциала при $\ell = 0$

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r \le R_0, \\ 0 & r > R_0, \end{cases}$$

для которого собственные значения энергии определяются из уравнения

$$a \cos a R_0 + k \sin a R_0 = 0,$$

где

$$a = \left(\frac{2m}{h^2}(V_0 - |E|)\right)^{1/2}, \quad k = \left(\frac{2m}{h^2}|E|\right)^{1/2}.$$

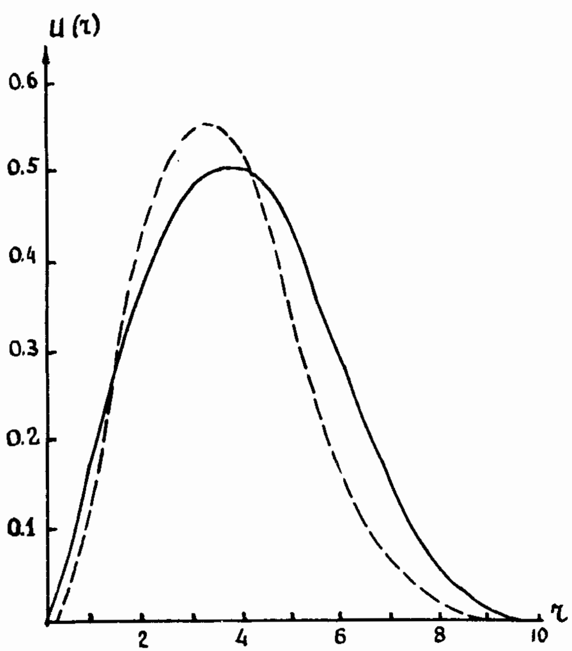
Результаты приведены в *табл. 1*.

Таблица 1

Уровни энергии (МэВ) для прямоугольного потенциала $R_0 = 7$, $V_0 = 50$ МэВ, $\ell = 0$.

	Точное решение	Разностное решение		
		M=N=100	M=N=500	M=N=1000
1s	-46,5059	-46,5146	-46,5063	-46,5060
2s	-36,1202	-36,1484	-36,1214	-36,1205
3s	-19,2679	-19,3109	-19,2669	-19,2689

В *табл. 2* приведены для сравнения собственные значения энергии для потенциала Саксона-Вудса, и на *рис 1* -



Радиальная волновая функция состояния 1s */сплошная линия - численный метод, описанный в данной работе, пунктирная линия - квазиклассический метод/.*

Таблица 2

Нейтронные уровни энергии (МэВ) для потенциала Саксона-Вудса. A = 239, $V_0 = 46,7$ МэВ, $R_0 = 1,26\ A^{1/3}$, $a = 1,45$, $\eta = 0,43$

$\ell = 0$

источник	1s	2s	3s	4s
работа /8/	-43,21	-32,87	-18,69	-3,81
данная работа	-42,84	-32,81	-18,94	-4,24

$\ell = 1$

источник	1p 3/2	1p 1/2	2p 3/2	2p 1/2	3p 3/2	3p 1/2
работа /8/	-39,48	-39,07	-26,88	-26,05	-11,64	-10,55
данная работа	-39,19	-38,79	-26,96	-26,15	-12,05	-10,97

$\ell = 2$

источник	1d 5/2	1d 3/2	2d 5/2	2d 3/2	3d 5/2	3d 3/2
работа /8/	-35,09	-34,08	-20,59	-18,89	-4,94	-3,18
данная работа	-34,91	-33,92	-20,81	-19,15	-5,43	-3,67

волновая функция состояния 1s, полученные данным и квазиклассическим методами /5,8/. Как видно из таблицы, погрешность квазиклассического метода при вычислении уровней энергии достигает в данном случае 0,5 *МэВ*.

Автор благодарит А.А.Корнейчука за полезные обсуждения и постоянное внимание к работе.

Литература

1. *В.Г.Соловьев. Теория сложных ядер, М., Наука, 1971.*
2. *П.Э.Немировский. Современные модели атомного ядра, М., Атомиздат, 1960.*
3. *Г.И.Марчук, В.Е.Колесов. Применение численных методов для расчета нейтронных сечений, М., Атомиздат, 1970.*
4. *Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина. В сб. "Программирование и математические методы решения физических задач". ОИЯИ, Д10-7707, Дубна, 1974.*
5. *Б.Н.Калинкин, Я.Грабовский, Ф.А.Гареев. Препринт ОИЯИ, Р-2682, Дубна, 1966.*
6. *С.К.Годунов, В.С.Рябенький. Разностные схемы, М., Наука, 1973.*
7. *В.А.Сапожников. В сб. "Труды Всесоюзного семинара по численным методам механики вязкой жидкости", Новосибирск, Наука, 1969.*
8. *Ф.А.Гареев, С.П.Иванова, Н.Ю.Ширикова. Сообщение ОИЯИ, Р4-5457, Дубна, 1970.*
9. *А.Н.Тихонов, А.А.Самарский. ЖВМ и МФ, 1, №5, /1961/.*

Рукопись поступила в издательский отдел 16 января 1976 года.