

C133.2
Г-467

4506/2-76

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



15/xi-76

P11 - 10029

М.Х.Гизаткулов, И.В.Пузынин, Р.М.Ямалеев

ПРОГРАММА И МЕТОД РЕШЕНИЯ
РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА
СО СФЕРИЧЕСКИ СИММЕТРИЧНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

1976

P11 - 10029

М.Х.Гизаткулов, И.В.Пузынин, Р.М.Ямалеев

ПРОГРАММА И МЕТОД РЕШЕНИЯ
РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА
СО СФЕРИЧЕСКИ СИММЕТРИЧНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Объединенный институт
ядерных исследований
Библиотека

I. Введение

В настоящей работе дается описание программы вычисления уровней энергии и соответствующих волновых функций радиального уравнения Шредингера

$$\frac{d^2}{dr^2} y_e + (\lambda - V(r)) y_e(r) = 0, \quad (I.1)$$

$0 \leq r < \infty$

в задачах дискретного и непрерывного спектров. В этой программе, в отличие от существующих, реализован единый метод численного решения задачи на связанные состояния и задачи рассеяния, включая определение резонансов, основанный на применении непрерывного аналога метода Ньютона^{/1,2/}.

Математическую постановку этих задач можно сформулировать следующим образом: для уравнения (I.1) необходимо найти нетривиальные решения $y_e(r)$, ограниченные на полуоси $0 \leq r < \infty$ и удовлетворяющие условию регулярности в особой точке

$$r=0, \quad y_e(r)=0. \quad (I.2)$$

При $\lambda < 0$ нетривиальные ограниченные решения существуют только для определенных значений $\lambda = \lambda_n$ и имеют экспоненциальную убывающую асимптотику при $r \rightarrow \infty$ (дискретный спектр):

$$y_e(r) \sim \exp(-\sqrt{-\lambda_n} r), \quad \lambda_n < 0. \quad (I.3)$$

При $\lambda > 0$ такие решения существуют при любом значении λ , и их асимптотика при $r \rightarrow \infty$ является осциллирующей (непрерывный спектр):

$$y_e(r) \sim \sin(\sqrt{\lambda} r + \delta(\lambda) - \epsilon T/2), \quad (I.4)$$

где $\delta(\lambda)$ — фаза рассеяния.

Особое положение среди состояний непрерывного спектра занимают квазистационарные состояния или резонансы. Известно^{/3/}, что

существует ряд определений резонансов, физическое содержание и математический формализм которых довольно сильно отличаются друг от друга. Однако во многих физических задачах можно выделить область подбарьерных энергий, где различные определения резонансных состояний приблизительно эквивалентны и могут быть сведены к условию на фазу рассеяния^{/4/}:

$$S(\lambda_n) = \frac{\pi}{2} (2n+1), \quad n=1, 2, \dots \quad (I.5)$$

В настоящей работе развивается единый метод решения задач дискретного и непрерывного спектра, который основан на представлении этих разнородных проблем как задачи на собственные значения или задачи с нелинейными краевыми условиями. Созданная программа является дальнейшим развитием программы SLIP^{/5/} и позволяет получить целый спектр состояний для заданного интервала энергий.

2. Метод решения

До последнего времени не существовало единого подхода к решению вышеперечисленных задач. Так, в задачах на связанные состояния для определения собственных значений применялась процедура сшивки внутренней волновой функции в области действия потенциала с известной асимптотикой^{/6/}. Волновая функция при этом находилась как решение задачи Коши с начальными условиями

$$y_c(c) = 0, \quad y'_c(c) = c, \quad (2.1)$$

где c — нормировочная константа.

Для существующих подходов характерно раздельное вычисление собственных значений и собственных функций. Это приводит к тому, что в ряде случаев точность вычисления энергий и волновых функций оказывается различной. Так, например, в работе^{/7/} был предложен

метод определения собственных значений как нулей определителя трехдиагональной матрицы, получающейся при конечно-разностной аппроксимации уравнения Шредингера (I.1). В задачах с ядерным потенциалом этот метод с достаточно большой точностью позволяет определить собственные значения (см. таблицу I), в то время как волновые функции, вычисленные по рекуррентной формуле, из-за накопления ошибок могут значительно отличаться от истинных (см. рис. I).

В работе^{/8/} квазистационарные состояния определялись как максимум интеграла от квадрата волновой функции в области действия потенциала; при этом решалась задача рассеяния как задача Коши с определенным шагом по энергии. Недостатки такого метода отмечены в работе^{/4/}.

В настоящей работе задача определения связанных и квазистационарных состояний рассматривается как задача на собственные значения. При этом асимптотические условия (I.3) в задаче на связанные состояния и (I.4) с заданными значениями фазы рассеяния (I.5) в задаче на квазистационарные состояния в достаточно удаленной точке $z = R$ аппроксимируются однородными граничными условиями вида

$$a(\lambda, R)y'_c(R) + b(\lambda, R)y_c(R) = 0. \quad (2.2)$$

Таким образом, задачи на связанные и квазистационарные состояния рассматриваются как задачи типа Штурма-Лиувилля^{/9/}.

Решение задачи рассеяния обычно сводится к численному решению задачи Коши с начальными условиями (2.1). Решение указанной задачи существующими методами приводит к вычислительным погрешностям, особенно в асимптотической области, устранение которых оказывается весьма сложной задачей.

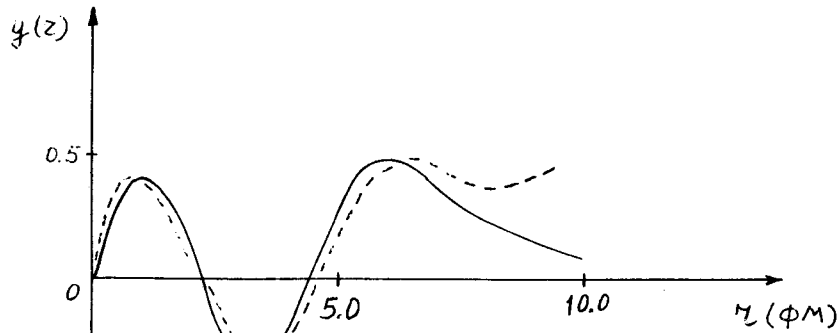


Рис. 1.

Сплошная кривая - волновая функция $33 I/2$ (параметры потенциала те же, что в Приложении), вычисленная с помощью изложенного метода при $R = 16$ фм, $k = 0.2$ фм; пунктирная кривая - волновая функция, вычисленная по рекуррентной формуле^{/7/}.

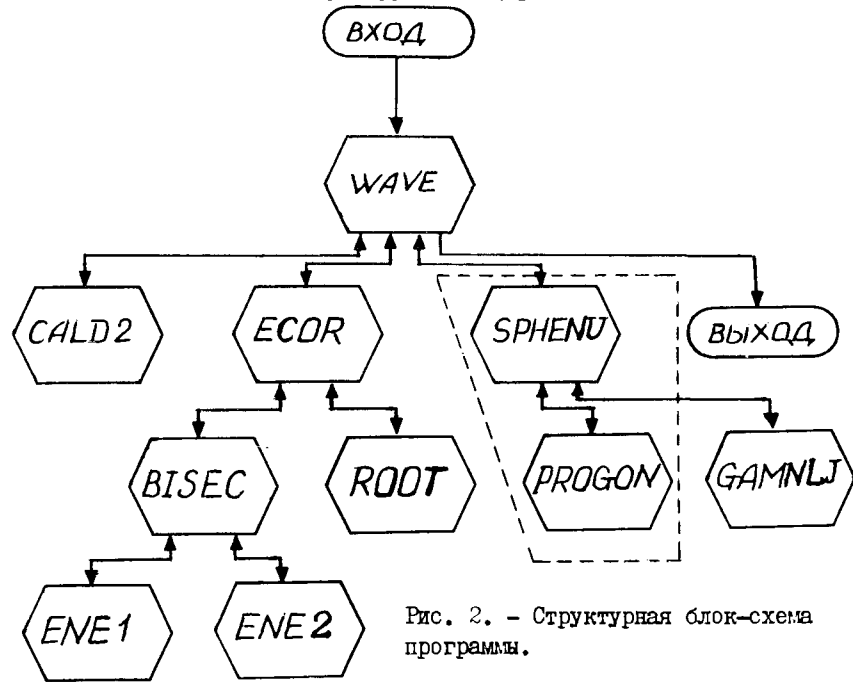


Рис. 2. - Структурная блок-схема программы.

Зафиксировав в асимптотическом условии (I.4) значение фазы рассеяния $\delta(\lambda)$, можно аппроксимировать это условие с помощью соотношения (2.2) и, таким образом, свести задачу рассеяния к задаче на собственные значения. Такой подход был предложен в работе^{/10/}. При этом определяются волновые функции $y_e(z)$ и значения энергии как функции фазы рассеяния $\lambda = \lambda(\delta)$. Однако такой метод удобен лишь в окрестности резонанса, где функция $\lambda = \lambda(\delta)$ ведет себя плавно.

В настоящей работе задача рассеяния формулируется как нелинейная краевая задача. Вывод нелинейного краевого условия при $z = R$, не содержащего неизвестной фазы $\delta(\lambda)$, основан на идее работы^{/11/}. Это краевое условие имеет вид

$$[F(\sqrt{\lambda} R) y_e'(R) - \sqrt{\lambda} F'(\sqrt{\lambda} R) y_e(R)]^2 + [G(\sqrt{\lambda} R) y_e(R) - \sqrt{\lambda} G'(\sqrt{\lambda} R) y_e'(R)]^2 - \lambda = 0, \quad (2.3)$$

где $F(\lambda, R)$, $G(\lambda, R)$ - регулярное и нерегулярное решения уравнения (I.1) без потенциала. При заданном значении энергии задача вычисления волновой функции в непрерывном спектре сводится к решению нелинейной краевой задачи (I.1), (I.2), (2.3), что позволяет повысить точность вычислений и вписать алгоритм численного решения в рамки предлагаемого метода.

Вывод нелинейного граничного условия (2.3) заключается в следующем. В асимптотической области ($z \gg R$) волновые функции и ее производную определим с помощью следующих соотношений:

$$y_e(z) = \alpha(\lambda) [\cos \delta(\lambda) F(\sqrt{\lambda} z) - \sin \delta(\lambda) G(\sqrt{\lambda} z)] \quad (2.4)$$

$$y_e'(z) = \sqrt{\lambda} \alpha(\lambda) [\cos \delta(\lambda) F'(\sqrt{\lambda} z) - \sin \delta(\lambda) G'(\sqrt{\lambda} z)]. \quad (2.5)$$

Введенные соотношения могут быть разрешены относительно $\delta(\lambda)$ и $\alpha(\lambda)^{1/4}$:

$$\delta(\lambda) = \arctg \frac{F(\sqrt{\lambda}z)y_e'(z) - \sqrt{\lambda} F'(\sqrt{\lambda}z)y_e(z)}{G(\sqrt{\lambda}z)y_e'(z) - \sqrt{\lambda} G'(\sqrt{\lambda}z)y_e(z)} \quad (2.6)$$

$$\lambda \alpha^2(z) = [F(\sqrt{\lambda}z)y_e'(z) - \sqrt{\lambda} F'(\sqrt{\lambda}z)y_e(z)]^2 + [G(\sqrt{\lambda}z)y_e'(z) - \sqrt{\lambda} G'(\sqrt{\lambda}z)y_e(z)]^2 \quad (2.7)$$

Выберем нормировку волновой функции $y_e(z)$ так, чтобы $\alpha^2(\lambda) = 1$. Тогда мы приходим к условию (2.3).

Задача на собственные значения (I.1), (I.2), (2.2), возникающая в случае определения связанных и квазистационарных состояний, а также нелинейная краевая задача (I.1), (I.2), (2.3), к которой можно свести задачу рассеяния, решается с помощью непрерывного аналога метода Ньютона [1, 2, 5]. При этом дискретное представление непрерывного по параметру t процесса реализовано с помощью метода Эйлера с переменным шагом интегрирования τ_k , а возникающие на каждом шаге полученного итерационного процесса линейные граничные задачи решаются численно с помощью метода прогонки [12].

3. Особенности реализации метода для потенциала Саксона-Вудса.

В данной программе потенциал $V(z)$ уравнения (I.1) задается в следующем виде:

$$V(z) = u(z) + u_{so}(z) + \frac{e(\ell+1)}{z^2} + u_c(z), \quad (3.1)$$

$$\text{где } u(z) = -V_0 \left[1 + \exp \frac{z-R_0}{a} \right]^{-1} \quad (3.2)$$

потенциал Саксона-Вудса,

$$u_{so}(z) = -\frac{\chi}{z} (\vec{\sigma} \vec{e}) \cdot \frac{d u(z)}{dz} \quad (3.3)$$

потенциал спин-орбитального взаимодействия,

$$\frac{e(\ell+1)}{z^2} \quad (3.4)$$

центробежный член,

$$u_c(z) = \begin{cases} \frac{(z-1)e^2}{R_0} \left[\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{z}{R_0} \right)^2 \right], & z \leq R_0 \\ \frac{(z-1)e^2}{z}, & z > R_0 \end{cases} \quad (3.5)$$

- кулоновский потенциал; V_0, a, R_0, χ - параметры потенциала; z, e - заряды ядра и электрона; $\frac{\vec{\sigma}}{2}, \vec{e}$ - операторы спина и момента соответственно [13].

Как видно из формул (3.1 - 3.5), кулоновский и центробежный потенциалы являются дальнедействующими, а потенциалы Саксона-Вудса и спин-орбитального взаимодействия - короткодействующими и убывают по экспоненциальному закону. В силу этих обстоятельств функции $a(\lambda, z)$ и $b(\lambda, z)$ в граничном условии (2.2) целесообразно выбрать следующим образом:

1) для связанных состояний ($\lambda < 0$)

$$a(\lambda, z) = h_e^{(1)}(i\sqrt{-\lambda}z)$$

$$b(\lambda, z) = -\frac{d}{dz} h_e^{(1)}(i\sqrt{-\lambda}z),$$

где $h_e^{(1)}(z)$ - функция Ганкеля [13];

2) для квазистационарных состояний ($\lambda > 0$):

$$a(\lambda, z) = n_e(\sqrt{\lambda}z)$$

$$b(\lambda, z) = -\frac{d}{dz} n_e(\sqrt{\lambda}z),$$

где $n_e(z)$ - нерегулярные кулоновские функции ($z \neq 0$) или нерегулярные функции Неймана-Бесселя ($z = 0$) [13].

4. Метод вычисления начальных собственных значений и собственных функций

В данной программе алгоритмы вычисления начальных собственных значений основан на методе, описанном в работе [7]. Суть этого

метода состоит в вычислении определителя трехдиагональной матрицы, получающейся при конечно-разностной аппроксимации уравнения (I.1). Нули определителя аппроксимируют собственные значения уравнения (I.1) с крайними условиями (I.2), (2.2). При этом начальные волновые функции можно вычислить по рекуррентной формуле^{/7/}, задавая начальные значения:

$$y_0(0) = 0, y_0'(0) = c.$$

Выбранные таким образом начальные волновые функции обеспечивают хорошую сходимость итерационного процесса в области $\lambda > 0$.

Для связанных состояний начальные волновые функции вычисляются с помощью метода прогонки.

5. Выбор параметра τ_k .

Наличие параметра τ_k позволяет сочетать в итерационном процессе устойчивость вычисления и скорость сходимости. В данной программе выбор τ_k осуществляется в соответствии с принципом минимума невязки для полученной дискретной задачи. Общие подходы к решению этой проблемы содержатся в работе^{/14/}. Поиск минимума невязки $\Delta_k(\tau)$ по τ в интервале $(0, I]$ в данной программе реализован наиболее простым способом. Вычисляется массив $\Delta(\tau)$ для нескольких значений $\tau_i (i = 1, 2, \dots)$, содержащихся в интервале $(0, I]$, а затем среди этих значений находится $\tau = \tau^*$, обеспечивающее минимум невязки. Если разбиение интервала $0 < \tau \leq I$ достаточно частое, то найденное значение минимума близко к истинному.

Далее принимается $\tau_k = \tau^*$, где τ_k - шаг k - той итерации.

6. Описание структуры и блок-схемы программы.

Настоящая программа написана на языке FORTRAN, что позволяет использовать ее на ЭВМ, имеющих соответствующее математиче-

ское обеспечение. Программа состоит из следующих основных подпрограмм:

- WAVE - в этой подпрограмме осуществляется ввод исходной информации и в соответствии с ней организуется режим работы подпрограмм, обеспечивающих решение заданного варианта задачи.
- ECOR - в этой подпрограмме вычисляются начальные собственные значения для связанных и квазистационарных состояний.
- ENE1 - в этой подпрограмме вычисляется определитель, соответствующий конечно-разностной аппроксимации второго порядка уравнения (I.1) и граничных условий (I.2), (2.2) для связанных состояний^{/7/}.
- ENE2 - в этой подпрограмме вычисляется тот же определитель для квазистационарных состояний.
- BISEC - в этой подпрограмме вычисляются нули определителя в заданном интервале изменения λ с помощью метода деления отрезка пополам.
- ROOT - в этой подпрограмме вычисляются нули заданного массива; она применяется для определения нижней и верхней границ потенциалов вида, приведенных на рис. 3.
- PROGON - в этой подпрограмме вычисляются решения краевых задач для линейного дифференциального уравнения II порядка.
- SPHENV - в этой подпрограмме реализована итерационная процедура на основе непрерывного аналога метода Ньютона для уравнения (I.1). Подпрограмма содержит следующие операторы блок-схемы:
 - 1) вычисление начальных волновых функций при заданных начальных собственных значениях;
 - 2) решение линейных краевых задач с помощью подпрограммы PROGON ;

- 3) выбор параметра τ_x ;
- 4) подготовка нового приближения;
- 5) выход по точности или по числу итераций;
- 6) печать результатов.

CALD2 - в этой подпрограмме вычисляется таблица значений потенциала (3.1) с заданным постоянным шагом в указанном интервале $[0, R]$.

GAMMLJ - в этой подпрограмме вычисляется ширина квазистационарного состояния согласно формуле (27) работы /4/.

Структурная блок-схема программы приведена на рис. 2.

В настоящей работе также используются библиотечные программы для вычисления регулярных и нерегулярных кулоновских функций и функций Неймана-Бесселя.

Логическая схема итерационного процесса приведена на рис. 4.

7. Режимы работы программы.

Программа может работать в трех режимах:

1. Вычисление для заданного потенциала связанных и квазистационарных состояний в интервале энергий от дна ямы до вершины барьера, а также волновых функций непрерывного спектра в заданном интервале с определенным шагом по энергии.

2. Вычисление состояния непрерывного спектра с данной энергией.

3. Вычисление связанных и квазистационарных состояний в заданном интервале энергий.

Для применения данной программы пользователю необходимо составить главную программу, в которой вызывается подпрограмма *WAVE* с формальными параметрами

$EMIN, EMAX, EN, EL, L, AJ, IREGIM, NP, LX.$

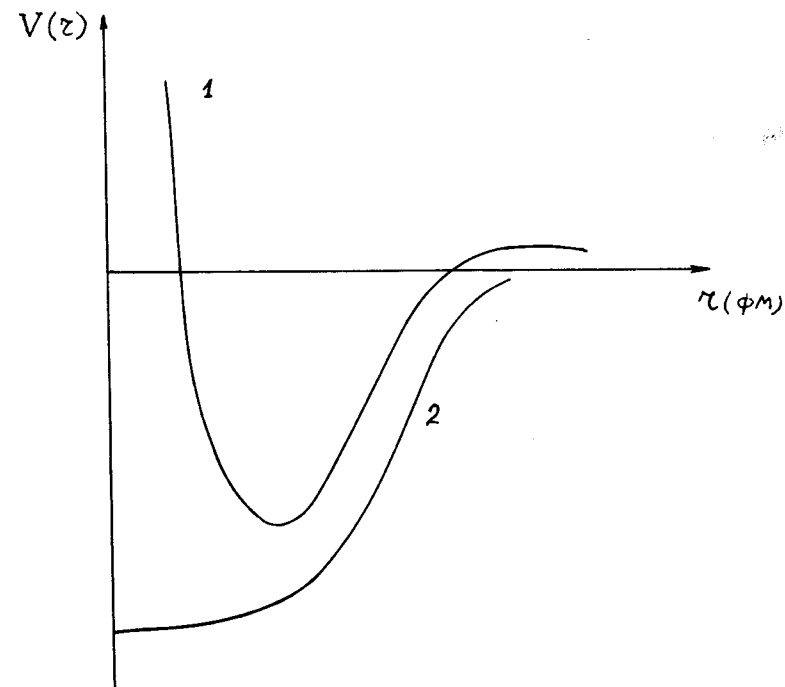


Рис. 3. - 1 - $V(z)$ (см. формулу (3.1)), с параметрами потенциала, приведенного в Приложении , $\ell = 3, j = 5/2$,
2 - $u(z)$ потенциал Саксона-Вудса.

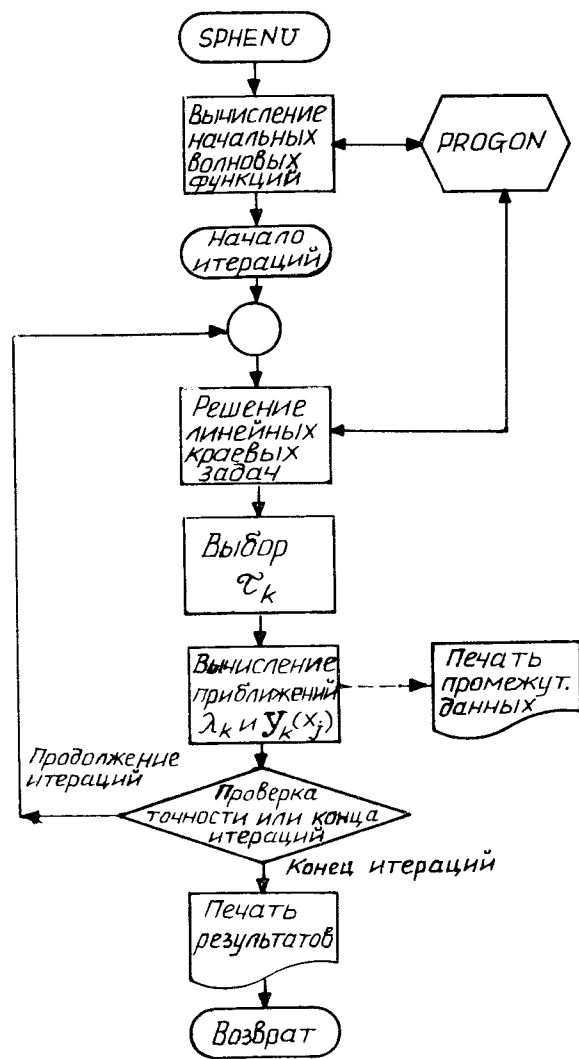


Рис. 4. - Логическая схема итерационного процесса.

Здесь E_{MIN} и E_{MAX} - нижняя и верхняя границы по энергии (в единицах $[фм J^{-2}]$);

E_H - шаг по энергии для состояния непрерывного спектра (в тех же единицах);

E_L - значение энергии для непрерывного спектра;

L - орбитальный момент;

$$AJ = L \pm \frac{1}{2}$$

$IREGIM$ - может принимать значения 1, 2, 3 соответственно задаваемым режимам;

NP - может принимать значения 0 или 1. При $NP = 0$ промежуточные результаты на печать не выдаются; при $NP = 1$ результаты каждой итерации выдаются на печать;

LX - количество точек, через которые необходимо выдавать на печать значения волновой функции.

В Приложении I приведен пример составления такой программы, которая будет работать в режиме I.

8. Ввод исходных данных.

Ввод исходных данных производится в следующем порядке:

NZY - максимальное число итераций. Вводится по формату (I3) на отдельной перфокарте.

Далее по формату (E 20, I0) вводятся следующие величины (каждая на отдельной перфокарте).

TVO - минимальное значение ϵ_k , если не существует минимума невязки по ϵ ;

$PEPS$ - минимальное значение невязки, достигнув которого, программа выходит со счета данного состояния;

HL - величина $\frac{2MN}{\hbar^2}$ в единицах $[МэВ \cdot фм^2 J^{-1}]$, где M_N - приведенная масса взаимодействующих частиц;

↑
программе WS это ¹⁵ параметр ALAM, см. стр 19

- \hbar - постоянная Планка;
 AK - величина e^2 в единицах [МэВ фм], где e - заряд электрона;
 EPS - точность вычисления начальных собственных значений;
 ENH - шаг поиска начальных собственных значений для квазистационарных состояний;
 EKH - шаг поиска начальных собственных значений для связанных состояний.

Далее по формату (2F3.0, 4F10.3) вводятся следующие величины:

- AV - атомный вес;
 Z - заряд (для нейтронов задавать $Z = 0$);
 RO - константа для вычисления радиуса ядра $R_0 = RO \cdot AV^{1/3}$;
 VO - глубина потенциала (МэВ);
 AKAPPA - константа спин-орбитального взаимодействия;
 ALFA - параметр диффузности ($ALFA = 1/a$, см. (3.2)).

Далее задаются на одной карте по формату (I4, E 20.10) величины:

- MX - число точек интегрирования;
 BB - предел интегрирования.

Пример печати результатов расчета по программе дан в Приложении (табл. I).

9. Точность вычислений. Зависимость от параметров разностной сетки

Точность результатов вычислений зависит как от числа итераций, так и от шага конечно-разностной сетки и предела интегрирования R .

Сходимость по числу итераций уровней энергии для связанных и квазистационарных состояний, а также фазы и волновых функций для состояний непрерывного спектра видна из данных контрольного варианта в Приложении. При этом невязка достигает заданной точности (10^{-7}) практически через 1-2 итерации для связанных состояний и через 4-5 итераций для состояний непрерывного спектра.

В таблице 2 приведена зависимость уровней энергии (в единицах фм⁻²) от предела интегрирования R с шагом $h = 0,1$ фм. Как видно из таблицы, имеется устойчивая сходимость результатов вычисления при увеличении R .

В таблице 3 приводится зависимость собственных значений и волновых функций от шага h разностной сетки. Как видно из таблицы, ошибка ведет себя как $O(h^2)$, что соответствует порядку применяемой аппроксимации (см. напр. /15/).

Таким образом, для задач с потенциалом (3.1 - 3.5) можно рекомендовать следующую разностную сетку $h = 0,1$ фм, $R = 3 \cdot RO \cdot AV^{1/3}$, где A - массовое число.

Для состояния непрерывного спектра представляет интерес сравнение следующих величин. Когда известна волновая функция, нормированная так, что $\alpha(\lambda) = 1$, синус фазы рассеяния можно определить двумя способами:

$$\sin \delta_e^j = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_0^R j_e(\sqrt{\lambda} z) u(z) y_e(z) dz \quad (9.1)$$

$$\sin \delta_e^j = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} [y_e'(R) j_e(\sqrt{\lambda} R) - \sqrt{\lambda} y_e(R) j_e'(\sqrt{\lambda} R)]. \quad (9.2)$$

В таблице 4 приведены $\sin \delta_e^j$, вычисленные с помощью формул (9.1) и (9.2). В таблице приведен случай $e = 0$, $j = 1/2$. Остальные параметры совпадают с параметрами контрольного варианта, приведенного в Приложении. Хорошее совпадение двух величин показывает, что волновая функция непрерывного спектра вычислена

с одинаковой точностью во всем интервале интегрирования. При тех же параметрах была получена энергия квазистационарного состояния $\lambda = 0,970$ (в ед. $[\text{фм}]^{-2}$) как собственное значение при условии

$$|\sin \delta_e^{\nu}(\lambda)| = 1, \quad \cos \delta_e^{\nu}(\lambda) = 0. \quad (9.3)$$

Далее, при $\lambda = 1,0$ были вычислены синус и косинус фазы волновой функции, которая определялась как решение нелинейной граничной задачи:

$$\sin \delta_e^{\nu}(\lambda) = 0,999, \quad \cos \delta_e^{\nu}(\lambda) = 0,004. \quad (9.4)$$

Из сравнения данных (9.3) и (9.4) следует взаимосогласованность изложенных подходов и полученных на их основе численных результатов.

Приложение

ОПИСАНИЕ КОНТРОЛЬНОГО ВАРИАНТА

I. Исходные данные.

В качестве контрольного варианта выбран расчет нейтронных уровней и волновых функций сферического ядра $A = 91$ с параметрами потенциала $R0 = 1,29$, $V0 = 45,0$ $AKAPPA = 0,413$, $ALFA = 1,613$

Основная программа организована следующим образом:

```
PROGRAM EXAMPL (INPUT, OUTPUT)
  IREGIM=1
  EMIN=0.1 $ EMAX=2.1 $ EH=0.05
  L=0 $ AJ=0.5
  NP=1
  LX=2
  CALL WAVE(EMIN,EMAX,EH,EL,L,AJ,IREGIM,
    ,LX,NP)
  END
```

При расчете начальных собственных значений для связанных и квазистационарных состояний использованы следующие данные:

$$EPS = 10^{-3}$$

$$EKN = 10^{-2}$$

$$ENVH = 10^{-2}$$

Максимальное число итерации: $NZZ = 10$.

Величина допустимой невязки: $PEPS = 10^{-7}$.

Минимальное значение ϵ_k : $TVO = 0.05$.

Величины μ ~~и~~ *приведенная масса нейтрона*

$HL = 0,04824$ и $AK = 1,44$ соответственно, число шагов интегрирования: $MX = 160$.

Предел интегрирования R : $BB = 16.0$. $0.04825 - M_n$

$0.04819 - M_p$

2. Печать результатов

Печать результатов осуществляется следующим образом.

Сначала печатаются параметры потенциала, данные для вычисления начальных собственных значений, шаг и интервал интегрирования.

Далее, в единицах $[\text{фм}]^{-2}$ печатаются начальные собственные значения для связанных и квазистационарных состояний непрерывного спектра. Потенциал печатается в тех же точках, что и волновые функции, согласно заданному параметру LX . Следующая печать зависит от задания параметра NP . Если $NP = 1$, то печатаются номер итерации, невязка, шаг по параметру t и собственные значения (в единицах МэВ). Если $NP = 0$, то печатаются только волновые функции и уровни энергии последней итерации. Если в результате расчета мы имеем квазистационарные состояния, то после печати волновых функций и энергии печатается ширина уровня $\Gamma/4$ в единицах (МэВ). Если имеем состояние непрерывного спектра, то печатается синус от фазы рассеяния $\delta_e^{\nu}(\lambda)$.

Таблица № I.

Печать результатов контрольного варианта

A= 91. | Z=-J. R=1.296 V0=45.000 KAPPA= .413 ALFA=1.613

PARAMETERS FOR FINDING OF INITIAL ENERGIES-

FPS= .100E-02 BKH= .010 EHM= .010

INTEGRATION INTERVAL SIZE H= .10E-02 RMAX= 16.000

INITIAL ENERGIES (1/FERMI**2) FOR STATE WITH L= L J= .5

-.1352875000E+01 -.1096625000E+01 -.2153750000E+00

.1000000000E+00 .1500000000E+00 .2000000000E+00

F	V(R)	R	V(R)
0.0000	-.217050022E+01	4.0000	-.203985808E+01
0.2000	-.217043656E+01	4.2000	-.199406941E+01
0.4000	-.217038106E+01	4.4000	-.193411640E+01
0.6000	-.2170322160E+01	4.6000	-.185703218E+01
0.8000	-.217026148E+01	4.8000	-.176117283E+01
1.0000	-.216969763E+01	5.0000	-.164132365E+01
1.2000	-.216927924E+01	5.2000	-.150296158E+01
1.4000	-.216869945E+01	5.4000	-.134494113E+01
1.6000	-.216790081E+01	5.6000	-.117478689E+01
1.8000	-.216679908E+01	5.8000	-.100079169E+01
2.0000	-.216527975E+01	6.0000	-.829732233E+00
2.2000	-.216318549E+01	6.2000	-.671741755E+00
2.4000	-.216030057E+01	6.4000	-.531902684E+00
2.6000	-.215632995E+01	6.6000	-.413151293E+00
2.8000	-.215087156E+01	6.8000	-.315803372E+00
3.0000	-.214338441E+01	7.0000	-.238283245E+00
3.2000	-.213312000E+01	7.2000	-.177966347E+00
3.4000	-.211911381E+01	7.4000	-.131875632E+00
3.6000	-.210099543E+01	7.6000	-.971396910E-01
3.8000	-.207843595E+01	7.8000	-.712338157E-01

R	V(R)	R	V(R)
8.0000	-.520031287E-01	12.0000	-.841372322E-04
8.2000	-.379584467E-01	12.2000	-.609381777E-04
8.4000	-.276251122E-01	12.4000	-.441356396E-04
8.6000	-.200783145E-01	12.6000	-.319660121E-04
8.8000	-.145791725E-01	12.8000	-.231519099E-04
9.0000	-.105787529E-01	13.0000	-.167681326E-04
9.2000	-.767211779E-02	13.2000	-.121445723E-04
9.4000	-.558206232E-02	13.4000	-.879588405E-05
9.6000	-.413123954E-02	13.6000	-.637054490E-05
9.8000	-.292117546E-02	13.8000	-.461395689E-05
10.0000	-.210443609E-02	14.0000	-.334172253E-05
10.2000	-.153330504E-02	14.2000	-.242028869E-05
10.4000	-.111073376E-02	14.4000	-.175292738E-05
10.6000	-.814577454E-03	14.6000	-.126958155E-05
10.8000	-.582735644E-03	14.8000	-.919511727E-06
11.0000	-.42121619E-03	15.0000	-.665988861E-06
11.2000	-.305743675E-03	15.2000	-.482359989E-06
11.4000	-.221447585E-03	15.4000	-.349339092E-06
11.6000	-.160390315E-03	15.6000	-.253013565E-06
11.8000	-.112167652E-03	15.8000	-.183240497E-06

ITER= 2 DELTA= .532197844E-05 TAU= .500000000E-11
THE WAVE FUNCTION FOR STATE WITH N= 2 L= 1

R	Y(R)	R	Y(R)
0.0000	0.	4.0000	.440959140E+00
0.2000	-.107191971E+00	4.2000	.+493210362E+00
0.4000	-.209791766E+00	4.4000	.527553615E+00
0.6000	-.303404710E+00	4.6000	.543509067E+00
0.8000	-.384022366E+00	4.8000	.542107999E+00
1.0000	-.448194022E+00	5.0000	.525263122E+00
1.2000	-.493177992E+00	5.2000	.495095645E+00
1.4000	-.517953600E+00	5.4000	.456659632E+00
1.6000	-.518809746E+00	5.6000	.411061935E+00
1.8000	-.498365351E+00	5.8000	.353808639E+00
2.0000	-.456672200E+00	6.0000	.316107949E+00
2.2000	-.395475912E+00	6.2000	.276671143E+00
2.4000	-.317434050E+00	6.4000	.239595460E+00
2.6000	-.225972493E+00	6.6000	.191769116E+00
2.8000	-.124800256E+00	6.8000	.133632500E+00
3.0000	-.184321597E-01	7.0000	.131626774E+00
3.2000	.887125487E-01	7.2000	.105213578E+00
3.4000	.192175401E+00	7.4000	.886465559E-01
3.6000	.287749827E+00	7.6000	.724292930E-01
3.8000	.371698992E+00	7.8000	.590615934E-01

MAX ITER= 2 MIN DELTA= .4177250744E-10

ITER= 39 DELTA= .976731327E+00 TAU= .990000000E-11
ITER= 39 DELTA= .822453217E-12 TAU= .100000000E+11
THE WAVE FUNCTION FOR STATE WITH N= 8 L= 1

R	Y(R)	R	Y(R)
0.0000	0.	4.0000	-.820417118E-01
0.2000	.121580193E+00	4.2000	.392862534E-11
0.4000	.231940637E+00	4.4000	.157303861E+00
0.6000	.320897842E+00	4.6000	.262117236E+00
0.8000	.380244644E+00	4.8000	.345617661E+00
1.0000	.404507709E+00	5.0000	.402189997E+00
1.2000	.391452497E+00	5.2000	.429124157E+00
1.4000	.342283919E+00	5.4000	.426610251E+00
1.6000	.261558497E+00	5.6000	.397317192E+00
1.8000	.156713267E+00	5.8000	.345852540E+00
2.0000	.374250523E-01	6.0000	.276579162E+00
2.2000	-.853111781E-01	6.2000	.196234021E+00
2.4000	-.203137019E+00	6.4000	.118574778E+00
2.6000	.374250523E-01	6.6000	.175485322E-01
2.8000	-.365926219E+00	6.8000	-.739673128E-01
3.0000	-.401649314E+00	7.0000	-.154011131E+00
3.2000	-.407678059E+00	7.2000	-.251298372E+00
3.4000	-.363237845E+00	7.4000	-.335024694E+00
3.6000	-.292907186E+00	7.6000	-.414697366E+00
3.8000	-.196239685E+00	7.8000	-.490009147E+00

SIN OF PHASE SHIFT= -.5876725195E+00

MAX ITER= 3 MIN DELTA= .9140237723E-12

E (EIGEN VALUE) = -.227326979E+02
 J = .5 L = -22.732755 (MEV)

R	Y(R)	R	Y(R)
8.000	.48923669E-01	12.000	.738159637E-03
8.200	.391190702E-01	12.200	.598690983E-03
8.400	.317954676E-01	12.400	.485594831E-03
8.600	.258283666E-01	12.600	.393774965E-03
8.800	.209725925E-01	12.800	.319314837E-03
9.000	.17245993E-01	13.000	.258699540E-03
9.200	.138167665E-01	13.200	.209871828E-03
9.400	.112116328E-01	13.400	.170175266E-03
9.600	.904665964E-02	13.600	.137759499E-03
9.800	.73088461E-02	13.800	.111503073E-03
10.000	.598709451E-02	14.000	.901511275E-04
10.200	.489670263E-02	14.200	.727644978E-04
10.400	.393986620E-02	14.400	.585784339E-04
10.600	.319578543E-02	14.600	.469689534E-04
10.800	.259213169E-02	14.800	.374254293E-04
11.000	.210262163E-02	15.000	.295280689E-04
11.200	.170549039E-02	15.200	.229295106E-04
11.400	.136339548E-02	15.400	.173395148E-04
11.600	.112205129E-02	15.600	.125122038E-04
11.800	.910092318E-03	15.800	.623524657E-05

Таблица № 2

Зависимость собственных значений от предела интегрирования

(шаг по оси h : $h = 0,1$ фм)

Параметры потенциала те же, что и в Приложении.

R (фм)	9,6	16,0	19,2
$n l j$	собственные значения (в ед. [фм] ²)		
$1 S_{1/2}$	- 1,8532	- 1,8532	- 1,8532
$2 S_{1/2}$	- 1,0965	- 1,0965	- 1,0965
$3 S_{1/2}$	- 0,2148	- 0,2149	- 0,2149

Таблица № 3.

Зависимость собственных значений и волновых функций от шага разностной сетки (R = 9,6 фм)

Параметры те же, что и в Приложении.

Шаг h по оси фм	0,2	0,1	0,05
Собственные значения [фм] ²	- 1,8534	- 1,8532	- 1,8531
κ_n (фм)	$y_{4S_{1/2}}(\kappa_n)$		
1,0	0,30756	0,30750	0,30749
5,0	0,26976	0,26999	0,27005
9,0	0,00216	0,00215	0,00215
Собственные значения [фм] ²	0,0536	0,0529	0,0530
κ_n (фм)	$y_{4S_{1/2}}(\kappa_n)$		
1,0	-0,32994	-0,33336	-0,33421
5,0	-0,31024	-0,31046	-0,31050
9,0	0,63287	0,62885	0,62779

E (EIGEN VALUE) = .310945274E+01
 E (EIGEN VALUE) = .310945274E+01
 J = .5 L = 3.109453 (MEV)

R	Y(R)	R	Y(R)
8.000	-.56675235E+00	12.000	-.82855705E+00
8.200	-.626765463E+00	12.200	-.782603398E+00
8.400	-.687963269E+00	12.400	-.731948810E+00
8.600	-.744022187E+00	12.600	-.676905734E+00
8.800	-.794975819E+00	12.800	-.617801721E+00
9.000	-.840615573E+00	13.000	-.554991619E+00
9.200	-.880794425E+00	13.200	-.488552353E+00
9.400	-.915371820E+00	13.400	-.419780862E+00
9.600	-.944218824E+00	13.600	-.348191334E+00
9.800	-.967222971E+00	13.800	-.274513396E+00
10.000	-.984292539E+00	14.000	-.199188935E+00
10.200	-.995360163E+00	14.200	-.122669756E+00
10.400	-.100038575E+01	14.400	-.454148203E-01
10.600	-.999358761E+00	14.600	.321125060E-01
10.800	-.992293852E+00	14.800	.109447228E+00
11.000	-.979262539E+00	15.000	.186125508E+00
11.200	-.960331285E+00	15.200	.261687448E+00
11.400	-.935626822E+00	15.400	.335679846E+00
11.600	-.905308897E+00	15.600	.407658915E+00
11.800	-.869535229E+00	15.800	.477192943E+00

Таблица № 4.

Сравнение $\sin \delta^{\sim}$, вычисленных по формулам (9.1) и (9.2)

Параметры потенциала те же, что и в Приложении .

Энергия (МэВ)	$\sin \delta^{(1)}$	$\sin \delta^{(2)}$
10,365	0,099185	0,099176
20,730	-0,027559	-0,027561

I - $\sin \delta^{(1)}$ по формуле (9.1),

II - $\sin \delta^{(2)}$ по формуле (9.2).

Литература

1. Е.П. Удков, Г.И. Магаренко, И.В. Пузынин. Непрерывный аналог метода Ньютона в нелинейных задачах физики. ЭЧАЯ 4, I, 127, 1973.
2. Ф.А. Гареев, Т.П. Пузынина, И.В. Пузынин, Р.М. Ямалеев. ОИИИ II-8081, Дубна, 1974.
3. Г.Брейт. Теория резонансных ядерных реакций. И.Л., Москва, 1960.
4. Е.Банг, Ф.А. Гареев, И.В. Пузынин, Р.М. Ямалеев. ОИИИ Р4-9054, Дубна, 1975.
5. Л.И. Пономарев, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина. ОИИИ Р4-6256, Дубна, 1972; ЖЭТФ, 65, 28, 1973.
И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина. КРК1-74-34, 93, Budapest, 1974.
6. В.Н. Kalinkin, Ya. Grabovski, F.A. Gareev. Acta Phys. Pol., XXX, 999, 1966.

7. Г.И. Марчук, В.Е. Колесов. Применение численных методов для расчета нейтронных сечений. Атомиздат, Москва, 1970.
8. С.А. Фаянс. Препринт ИАЭ-1593, 1968.
9. Г.Е. Шилов. Математический анализ. Специальный курс. Физматгиз, М., 1960.
10. Л.И. Пономарев, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина. Препринт ОИИИ, Р4-8884, Дубна, 1975.
11. R. Huss, R. Kalaba, R. Vasudevan. J. Math. Phys., 15, 8, 1974.
12. С.К. Годунов, В.С. Рябенский. Введение в теорию разностных схем. Физматгиз, Москва, 1962.
13. Ф. Калоджеро. Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния. "Мир", М., 1972.
14. Л.А. Кивистик. Докл. АН СССР, 136, I, 1961.
15. А.Н. Тихонов. А.А. Самарский. ЖМ и МФ, I, 784, 1961.
А.А. Самарский. Введение в теорию разностных схем. Наука, М., 1971.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 августа 1976 года.