

С 323
Т-789

957/2-77

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

21/3-77



P11 - 10207

Н.Ф.Трускова

ОПРЕДЕЛЕНИЕ С ЗАДАННОЙ ТОЧНОСТЬЮ
СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ
И СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ЗАДАЧИ
ДУХУ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1976

P11 - 10207

Н.Ф.Трускова

ОПРЕДЕЛЕНИЕ С ЗАДАННОЙ ТОЧНОСТЬЮ
СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ
И СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ЗАДАЧИ
ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

Трускова Н.Ф.

P11 - 10207

Определение с заданной точностью собственных функций
и собственных значений задачи двух центров квантовой механики

Создана программа определения с заданной точностью собственных функций и собственных значений задачи двух центров квантовой механики. Собственные значения ρ, λ находятся с помощью минимизации обернутых цепных дробей, вычисленных с необходимой точностью. Собственные функции определяются посредством суммирования соответствующих рядов. Используемый алгоритм позволяет получить требуемые решения при сравнительно небольших затратах машинного времени. При этом вычисления можно производить не только с малым, но и с достаточно большим шагом по R . При необходимости программа определяет также производные $\frac{\partial \lambda}{\partial R}, \frac{\partial \rho}{\partial R}, \frac{\partial E}{\partial R}$.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований
Дубна 1976

Truskova N.F.

P11 - 10207

Calculation with the Accuracy Needed of the Eigenvalues
and the Eigenfunctions of the Two-Centre in Quantum
Mechanics

A computer program is prepared for the calculation with the accuracy needed of the eigenvalues and the eigenfunctions of the two-centre problem in quantum mechanics. The eigenvalues ρ, λ are obtained using the minimization of the enveloped continued fractions, which are calculated with the accuracy required. The eigenfunctions are calculated by means of the summation of suitable series. The algorithm allows one to get the solutions for comparatively little computing time. One can carry out calculations using not only a small step in internuclear distance R , but also one large enough. If needed the program evaluates derivatives $\frac{\partial \lambda}{\partial R}, \frac{\partial \rho}{\partial R}, \frac{\partial E}{\partial R}$ too.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research
Dubna 1976

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы в ОИЯИ, а также в других институтах интенсивно проводятся эксперименты по рассеянию тяжелых ионов /1-6/. Установлено, что наблюдаемый в этих экспериментах континуум γ -квантов является квазимолекулярным /1-6/.

При фиксированных значениях межъядерного расстояния рассеиваемые ионы образуют квазимолекулярные состояния, которые при малых и средних значениях зарядов ядер можно описывать с помощью решений уравнения Шредингера с двухцентровым потенциалом. В связи с этим определение собственных значений и собственных функций уравнения Шредингера с таким потенциалом, обычно называемое задачей двух центров квантовой механики /7/, при используемых в экспериментах значениях зарядов ядер представляет существенный интерес.

В приближении адиабатичности при данных $Z_1, Z_2, R, n_\xi, n_\eta, m$ задача сводится к нахождению собственных значений λ, ρ и ограниченных собственных функций $F(\xi), \Phi(\eta)$ системы уравнений

$$[(\xi^2 - 1) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + 2\xi \frac{\partial}{\partial \xi} - p^2(\xi^2 - 1) + b'\xi + \lambda - \frac{m^2}{\xi^2 - 1}] F(\xi) = 0$$

$$[(1 - \eta^2) \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} - 2\eta \frac{\partial}{\partial \eta} - p^2(1 - \eta^2) + b\eta - \lambda - \frac{m^2}{1 - \eta^2}] \Phi(\eta) = 0. /1/$$

Здесь: R - расстояние между ядрами; Z_1, Z_2 - заряды ядер; m - магнитное квантовое число; n_ξ - число нулей функции $F(\xi)$ при $1 \leq \xi < \infty$, n_η - число нулей функции $\Phi(\eta)$ при $-1 \leq \eta \leq 1$; E - энергия электрона.

$$b = R(Z_2 - Z_1); \quad b' = R(Z_2 + Z_1); \quad m = |m|; \quad p^2 = -\frac{R^2 E}{2}. \quad /2/$$

Используемая здесь система единиц $\hbar = m_e c = 1$. Вместо чисел n_ξ, n_η, m для классификации состояний обычно пользуются сферическими квантовыми числами N, L, M объединенного атома с зарядом $Z_1 + Z_2$:

$$N = n_\xi + L + 1; \quad L = n_\eta + M; \quad M = |m|. \quad /3/$$

Числа N, L, M связаны с параболическими квантовыми числами n_1, n_2, n'_1, n'_2 изолированных атомов с зарядами Z_1 и Z_2 , соответственно, с помощью соотношений⁸ для eZ_1 термов: $N = n_1 + L + 1$; $n = n_1 + n_2 + M + 1$

$$L = \begin{cases} 2n_2 + M + n \frac{(Z_2 - Z_1)}{Z_1}, & \text{если } n \cdot \frac{Z_2}{Z_1} = \text{целому числу;} \\ n_2 + M + 1 + \text{Ent}\left(n_2 + \frac{n(Z_2 - Z_1)}{Z_1}\right), & \text{если } \frac{n \cdot Z_2}{Z_1} \neq \text{целому числу.} \end{cases} \quad /4/$$

для eZ_2 термов: $N = n'_1 + L + 1$; $n' = n'_1 + n'_2 + M + 1$;

$$L = \begin{cases} n'_2 + M, & \text{если } n'_2 < n' \frac{(Z_2 - Z_1)}{Z_2}; \\ n'_2 + M + 1 + \text{Ent}\left(n'_2 - \frac{n'(Z_2 - Z_1)}{Z_2}\right), & \text{если } n'_2 > n' \frac{(Z_2 - Z_1)}{Z_2}. \end{cases} \quad /5/$$

Данная задача исследовалась многими авторами /см. /7,8-18/. К сожалению, подробные результаты опубликованы, в основном, лишь для $Z_1 = Z_2 = 1$ и, частично, для $Z_1 = 1, Z_2 = 2, 3, \dots, 8$ /11-17/. Используемые же в экспериментах по рассеянию тяжелых ионов значения зарядов

ядер таковы: $Z_1 = 28, Z_2 = 41$; $Z_1 = 36, Z_2 = 41$; $Z_1 = 35, Z_2 = 40$ /1-6/ и т.д.

В ОИЯИ с 1966 года существует программа "TERMN", которая определяет собственные значения и собственные функции исследуемой задачи. Алгоритм вычисления многочленов, из равенства нулю которых находятся собственные значения λ, p в этой программе, изложен в работах /14,15/.

По программе "TERMN", любезно предоставленной Л.И.Пономаревым и Т.П.Пузыриной автору, при малом шаге по R , требуемом этой программой, посчитано несколько термов для случая $Z_1 = Z_2 = 1$, а также для случая $Z_1 = 41, Z_2 = 49$. Однако ввиду того, что для вычисления большого числа термов по этой программе потребовалось бы значительное количество машинного времени, была предпринята попытка несколько иначе, чем в программе "TERMN", подойти к решению поставленной задачи, а именно: минимизировать n_ξ, n_η раз обернутые цепные дроби, вычисленные с необходимой точностью ϵ . Для минимизации использован упрощенный вариант метода линеаризации, предложенного И.Н.Силиным /19/.

Соответствующая программа реализована на языке FORTRAN (CDC-6500) и применима для решения поставленной задачи в широкой области значений Z_1, Z_2, R, N, L, M . Для получения решений с относительной точностью $\tilde{\epsilon} = 10^{-12} \div 10^{-7}$ требуется сравнительно небольшое время счета. Так как вычисления можно производить не только с малым, но и с достаточно большим шагом по R , появляется возможность вычислить довольно большое число термов за короткое время. При необходимости программа определяет с заданной точностью также и производные $\frac{\partial \lambda}{\partial R}, \frac{\partial p}{\partial R}, \frac{\partial E}{\partial R}$, применяемые в ряде физических задач.

2. ОПИСАНИЕ АЛГОРИТМА

Для определения функций $F(\xi), \Phi(\eta)$ используем разложения /9-11/

$$F(\xi) = (\xi^2 - 1)^{\frac{m}{2}} (\xi + 1)^\sigma e^{-p(\xi-1)} \sum_{\ell=0}^{\infty} A_\ell \left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^\ell; \quad /6/$$

$$\sigma = \frac{b'}{2p} - m - 1;$$

$$\Phi(\eta) = e^{-p(1+\eta)} \sum_{\ell=0}^{\infty} B_{\ell} P_{\ell+m}^m(\eta) \text{ для } \epsilon Z_1 \text{-термов } -1 \leq \eta \leq 0; \quad /7/$$

$$\Phi(\eta) = e^{-p(1-\eta)} \sum_{\ell=0}^{\infty} \tilde{B}_{\ell} P_{\ell+m}^m(\eta) \text{ для } \epsilon Z_2 \text{-термов } 0 \leq \eta \leq 1; \quad /8/$$

$$\Phi(\eta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_{\ell} P_{2\ell+m+\delta}^m(\eta); \quad \delta = \begin{cases} 0 & \text{если } L-m=2n; \\ 1 & \text{если } L-m=2n+1; n=0,1,2,\dots \end{cases} \quad /9/$$

Если $Z_1 \neq Z_2$, то, не ограничивая общности, полагаем $Z_1 < Z_2$. Разложением /9/ пользуемся только при $Z_1 = Z_2 = Z$. Коэффициенты A_{ℓ} , B_{ℓ} , \tilde{B}_{ℓ} , C_{ℓ} удовлетворяют рекуррентным соотношениям:

$$A_{\ell+1} a_{\ell} + A_{\ell-1} \gamma_{\ell} + A_{\ell} \beta_{\ell} = 0; \quad A_{-1} = 0; \quad A_0 = 1 \quad /10/$$

$$a_{\ell} = (\ell+m)(\ell+m+1); \quad \beta_{\ell} = 2\ell(\ell+2p-\sigma) - 2p\sigma - \lambda - (m+1)(m+\sigma);$$

$$\gamma_{\ell} = (\ell-1-\sigma)(\ell-m-1-\sigma);$$

$$B_{\ell+1} \tilde{a}_{\ell} + B_{\ell-1} \tilde{\gamma}_{\ell} + B_{\ell} \tilde{\beta}_{\ell} = 0; \quad B_{-1} = 0; \quad B_0 = 1. \quad /11/$$

$$\tilde{a}_{\ell} = \frac{(\ell+2m+1)(b-2p(\ell+m+1))}{2(\ell+m)+3}; \quad \tilde{\beta}_{\ell} = \lambda + (\ell+m)(\ell+m+1);$$

$$\tilde{\gamma}_{\ell} = \frac{\ell(b+2p(\ell+m))}{2(\ell+m)-1}; \quad \tilde{B}_{\ell}(b) = (-1)^{\ell} B_{\ell}(-b).$$

$$C_{\ell+1} \tilde{a}_{\ell} + C_{\ell-1} \tilde{\gamma}_{\ell} + C_{\ell} \tilde{\beta}_{\ell} = 0; \quad C_{-1} = 0; \quad C_0 = 1 \quad /12/$$

$$\tilde{a}_{\ell} = \frac{-p^2(2\ell+\delta+2m+2)(2\ell+\delta+2m+1)}{(4\ell+2\delta+2m+1)(4\ell+2\delta+2m+3)};$$

$$\tilde{\gamma}_{\ell} = \frac{-p^2(2\ell+\delta)(2\ell+\delta-1)}{(4\ell+2\delta+2m-1)(4\ell+2\delta+2m+1)};$$

$$\tilde{\beta}_{\ell} = \lambda + (2\ell+\delta+m)(2\ell+\delta+m+1) + p^2 -$$

$$-p^2 \left[\frac{(2\ell+\delta)(2\ell+\delta+2m)}{(4\ell+2\delta+2m+1)(4\ell+2\delta+2m-1)} + \right.$$

$$\left. + \frac{(2\ell+\delta+2m+1)(2\ell+\delta+1)}{(4\ell+2\delta+2m+1)(4\ell+2\delta+2m+3)} \right].$$

Введем величину

$$N_{n\xi+1} = -a_{n\xi} A_{n\xi+1} / A_{n\xi}; \quad n\xi = N-L-1; \quad /13/$$

Используя соотношения /10/, получаем, что $N_{n\xi+1}$ равна бесконечной цепной дроби

$$N_{n\xi+1} = \cfrac{\cfrac{a_{n\xi} \gamma_{n\xi+1}}{\delta_{n\xi+1}}}{\cfrac{\beta_{n\xi+1}}{\delta_{n\xi+1}}} - \cfrac{\cfrac{a_{n\xi+1} \gamma_{n\xi+2}}{\delta_{n\xi+1} \delta_{n\xi+2}}}{\cfrac{\beta_{n\xi+2}}{\delta_{n\xi+2}}} - \cfrac{\cfrac{a_{n\xi+2} \gamma_{n\xi+3}}{\delta_{n\xi+2} \delta_{n\xi+3}}}{\dots} \quad /14/$$

Множитель $\delta_n = (N+n)(N+n+1)$ вводится во избежание больших промежуточных чисел. Введение такого множителя является эквивалентным преобразованием, широко применяемым в теории цепных дробей^{/20/}. При вычислении цепных дробей в данной задаче подобные множители вводились в ряде работ^{/9,14,15/}.

С другой стороны, величина $N_{n\xi+1}$ равна конечной дроби:

$$N_{n\xi+1} = -b_0 = \frac{\beta_{n\xi} - \gamma_{n\xi} a_{n\xi-1}}{\beta_{n\xi-1} - \gamma_{n\xi-1} a_{n\xi-2}} = \frac{\beta_1 - \gamma_1 a_0}{\beta_0} \quad /15/$$

Приравнивая выражения /14/ и /15/, получаем:

$$U_1 = b_0 + \frac{a_1}{b_1} + \frac{a_2}{b_2} + \frac{a_3}{b_3} + \dots = 0. \quad /16/$$

Здесь введены обозначения:

$$a_1 = \frac{a_{n\xi} \gamma_{n\xi+1}}{\delta_{n\xi+1}}; \quad b_1 = \frac{\beta_{n\xi+1}}{\delta_{n\xi+1}}; \quad a_n = -\frac{a_{n\xi+n-1} \gamma_{n\xi+n}}{\delta_{n\xi+n-1} \delta_{n\xi+n}};$$

$$b_n = \frac{\beta_{n\xi+n}}{\delta_{n\xi+n}}; \quad n=2,3,\dots \quad /17/$$

Производя аналогичные выкладки с использованием рекуррентных соотношений /11/, получаем:

$$U_2 = \tilde{b}_0 + \frac{\tilde{a}_1}{\tilde{b}_1} + \frac{\tilde{a}_2}{\tilde{b}_2} + \frac{\tilde{a}_3}{\tilde{b}_3} + \dots = 0. \quad /18/$$

Здесь:

$$\tilde{a}_1 = \frac{\tilde{a}_n \gamma_{n\eta+1}}{\tilde{\delta}_{n\eta+1}}; \quad \tilde{b}_1 = \frac{\tilde{\beta}_{n\eta+1}}{\tilde{\delta}_{n\eta+1}}; \quad n_\eta = L - m;$$

$$\tilde{\delta}_n = (n+m)(n+m+1);$$

$$\tilde{a}_n = -\frac{\tilde{a}_{n\eta+n-1} \tilde{\gamma}_{n\eta+n}}{\tilde{\delta}_{n\eta+n-1} \tilde{\delta}_{n\eta+n}}; \quad \tilde{b}_n = \frac{\tilde{\beta}_{n\eta+n}}{\tilde{\delta}_{n\eta+n}}; \quad n=2,3,4,\dots$$

$$-\tilde{b}_0 = \tilde{\beta}_{n\eta} - \frac{\tilde{\gamma}_{n\eta} \tilde{a}_{n\eta-1}}{\tilde{\beta}_{n\eta-1}} - \frac{\tilde{\gamma}_{n\eta-1} \tilde{a}_{n\eta-2}}{\tilde{\beta}_{n\eta-2}} - \dots - \frac{\tilde{\gamma}_1 \tilde{a}_0}{\tilde{\beta}_1} / \tilde{\beta}_0.$$

При $Z_1 = Z_2$, используя соотношения /12/, методом, развитым в работах^{/18/}, получаем вместо дроби U_2 соответствующую бесконечную цепную дробь \tilde{U}_2 . Сходимость цепных дробей U_1, U_2, \tilde{U}_2 , а также сходимость соответствующих разложений /6/, /7-8/, /9/ доказана в работах^{9,21/}.

При практическом вычислении U_1 /а также U_2 или \tilde{U}_2 / с заданной точностью ϵ при любых необходимых $\lambda, \rho, R, N, L, m$ пользуемся тем, что n -ая аппроксимация цепной дроби U_1 , определяемая как

$$U_1^{(n)} = b_0 + \frac{a_1}{b_1} + \frac{a_2}{b_2} + \dots + \frac{a_n}{b_n}, \quad /19/$$

равна²⁰

$$U_1^{(n)} = \frac{A_n}{B_n},$$

где A_n - n-ый числитель цепной дроби U_1 ; B_n - n-ый знаменатель цепной дроби U_1 ; A_n, B_n удовлетворяют соотношениям:

$$\begin{aligned} A_{-1} &= 1; \quad A_0 = b_0; \quad A_k = b_k A_{k-1} + a_k A_{k-2}; \\ B_{-1} &= 0; \quad B_0 = 1; \quad B_k = b_k B_{k-1} + a_k B_{k-2}; \quad k = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \quad /20/$$

Как известно^{/20/}, величина сходящейся цепной дроби равна пределу:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{A_n}{B_n}. \quad /21/$$

Программа последовательно вычисляет все A_n, B_n , начиная с $n=1$, до тех пор, пока не достигнет такого n_1 , что будут выполняться условия:

$$\begin{aligned} |B_{n_1-1}| > 10^{-30}; \quad |B_{n_1}| > 10^{-30} \\ \left| \frac{A_{n_1}}{B_{n_1}} - \frac{A_{n_1-1}}{B_{n_1-1}} \right| \leq \epsilon_1 \left| \frac{A_{n_1}}{B_{n_1}} \right|. \end{aligned} \quad /22/$$

По достижении этих условий вычисление A_n, B_n прекращается, и мы получаем величину цепной дроби $U_1 = \frac{A_{n_1}}{B_{n_1}}$, найденную с заданной точностью ϵ_1 . В программе

всегда полагается $\epsilon_1 < \tilde{\epsilon}$, где $\tilde{\epsilon}$ - точность вычисления λ, p .

Для любых R, Z_1, Z_2, N, L, m программа определяет величину I_1 /и аналогичные ей величины I_2 или \bar{I}_2 /, равную максимальному числу из всех n_1 / n_2 или \bar{n}_2 /, необходимых для вычисления U_1 / U_2 или \bar{U}_2 / с заданной точностью ϵ_1 при всех используемых при этом λ, p . Как показывает анализ результатов, $I_1, I_2(\bar{I}_2)$ при

данных $\tilde{\epsilon}, Z_1, Z_2, N, L, m$ довольно значительно изменяются с изменением R, I_1 при увеличении R , как правило, уменьшается, а $I_2(\bar{I}_2)$ увеличивается. Например, при $Z_1=36, Z_2=41$ для 1σ состояния при $\tilde{\epsilon}=10^{-12}$ $I_1=85, I_2=14$ при $R=0,02$. При увеличении R до $R=1,8$ величина I_1 уменьшается до 11, а I_2 увеличивается до 79. Для $Z_1=Z_2=1$ при $R=1$ и $\tilde{\epsilon}=10^{-12}$ для 1σ состояния $\bar{I}_2=5$, а при $R=15$, $\bar{I}_2=37$. Для $Z_1=41, Z_2=49$ / $2p\sigma$ - состояние, $\tilde{\epsilon}=10^{-12}$ / при $R=0,03$, $I_1=123$, $I_2=18$. При увеличении R до $R=2,0$ I_1 уменьшается до 7, I_2 увеличивается до 76. Отсюда видно, что если при вычислении U_1 / U_2 или \bar{U}_2 / положить I_1 / I_2 или \bar{I}_2 / равным некоторому максимальному числу $I_{1\max} / I_{2\max}$ или $\bar{I}_{2\max}$ /, постоянному для всех R, N, L, m, Z_1, Z_2 , то получится значительный перерасход машинного времени.

Производные $\frac{\partial U_1}{\partial \lambda}, \frac{\partial U_1}{\partial p}, \frac{\partial U_2}{\partial \lambda}, \frac{\partial U_2}{\partial p}$ /и если необходимо $\frac{\partial U_1}{\partial R}, \frac{\partial U_2}{\partial R}$ / определяются с помощью непосредственного дифференцирования соотношений /20/ и /21/.

Для определения величин $\lambda = \lambda^{NL,m}(R)$ и $p = p^{NL,m}(R)$ из уравнений /16/ и /18/ минимизируем функционал:

$$F(p, \lambda) = \max(|U_1|, |U_2|) \quad /23/$$

методом линеаризации^{/19/}. Необходимые при этом начальные значения $\lambda_0 = \lambda_0^{N,L,m}(R), p_0 = p_0^{NL,m}(R)$ для первого значения $R=R_1$ полагаем равными асимптотическим выражениям для $\lambda_{\text{асимп}}$ и $p_{\text{асимп}}$ при $R \rightarrow 0$ ^{/8/}:

$$p_{\text{асимп.}} = \frac{R}{2} \sqrt{-2E_{\text{асимп.}}};$$

$$E_{\text{асимп.}} = - \frac{(Z_1 + Z_2)^2}{2N^2} - \frac{2R^2 \cdot Z_1 \cdot Z_2 (Z_1 + Z_2)^2}{N^3 (2L-1)(2L+1)(2L+3)} \left(1 - \frac{3m^2}{L(L+1)}\right)$$

$$\lambda_{\text{асимп.}} = -L(L+1) - \frac{1}{2} p_{\text{асимп.}}^2 \left(1 + \frac{m^2}{L(L+1)}\right) - \frac{1}{8} \cdot R^2 \frac{(Z_2 - Z_1)^2}{N^2} \cdot \left(1 - \frac{3m^2}{L(L+1)}\right). \quad /24/$$

Естественно, что R_1 должно быть выбрано таким образом, чтобы эти асимптотики удовлетворялись. В программе требуется, чтобы

$$R_1 \cdot \sqrt{\frac{Z_1 \cdot Z_2}{N}} \leq 0,5. \quad /25/$$

Для $R=R_2$ начальные значения $p_0 = p_0^{N,L,m}(R_2)$, $\lambda_0 = \lambda_0^{N,L,m}(R_2)$ определяем уже после нахождения с необходимой точностью значений $p^{N,L,m}(R_1)$, $\lambda^{N,L,m}(R_1)$. Используя их, а также производные

$$\frac{\partial p}{\partial R} \Big|_{R_1} = \frac{\partial p_{\text{асимп.}}}{\partial R} \Big|_{R_1} \quad \text{и} \quad \frac{\partial \lambda}{\partial R} \Big|_{R_1} = \frac{\partial \lambda_{\text{асимп.}}}{\partial R} \Big|_{R_1}, \quad /26/$$

получаем

$$p_0^{N,L,m}(R_2) = p^{N,L,m}(R_1) + \frac{\partial p}{\partial R} \Big|_{R_1} \cdot (R_2 - R_1)$$

$$\lambda_0^{N,L,m}(R_2) = \lambda^{N,L,m}(R_1) + \frac{\partial \lambda}{\partial R} \Big|_{R_1} \cdot (R_2 - R_1). \quad /27/$$

При всех последующих $R=R_i$, $i=3,4,5 \dots$ значения $p_0^{N,L,m}(R_i)$, $\lambda_0^{N,L,m}(R_i)$ задаем в виде:

$$p_0^{N,L,m}(R_i) = p^{N,L,m}(R_{i-1}) + \frac{\partial p}{\partial R} \Big|_{R_{i-1}} \cdot (R_i - R_{i-1}) +$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{\left(\frac{\partial p}{\partial R} \Big|_{R_{i-1}} - \frac{\partial p}{\partial R} \Big|_{R_{i-2}}\right) (R_i - R_{i-1})^2}{(R_{i-1} - R_{i-2})}$$

$$\lambda_0^{N,L,m}(R_i) = \lambda^{N,L,m}(R_{i-1}) + \frac{\partial \lambda}{\partial R} \Big|_{R_{i-1}} \cdot (R_i - R_{i-1}) +$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{\left(\frac{\partial \lambda}{\partial R} \Big|_{R_{i-1}} - \frac{\partial \lambda}{\partial R} \Big|_{R_{i-2}}\right) (R_i - R_{i-1})^2}{(R_{i-1} - R_{i-2})} \quad /28/$$

где

$$\frac{\partial p}{\partial R} \Big|_{R_{i-1}} = \frac{p(R_{i-1}) - p(R_{i-2})}{R_{i-1} - R_{i-2}};$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial R} \Big|_{R_{i-1}} = \frac{\lambda(R_{i-1}) - \lambda(R_{i-2})}{R_{i-1} - R_{i-2}}; \quad i=3,4,5 \dots$$

Выбор квадратичной интерполяции /28/ для $p_0(R_i)$, $\lambda_0(R_i)$ позволяет /в отличие от линейной/ точнее задать начальные значения для искомых величин p, λ , что в конечном итоге приводит к уменьшению числа итераций и сокращению времени счета.

Приращения Δp_j и $\Delta \lambda_j$ для каждой j -ой итерации находятся по формулам:

$$\Delta p_j = \frac{\left(U_1 \frac{\partial U_2}{\partial \lambda} - U_2 \frac{\partial U_1}{\partial \lambda}\right)}{\left(\frac{\partial U_1}{\partial p} \frac{\partial U_2}{\partial \lambda} - \frac{\partial U_2}{\partial p} \frac{\partial U_1}{\partial \lambda}\right)} \Big|_{p=p_{j-1}, \lambda=\lambda_{j-1}}$$

$$\Delta \lambda_j = \frac{(U_1 \frac{\partial U_2}{\partial p} - U_2 \frac{\partial U_1}{\partial p})}{(\frac{\partial U_2}{\partial p} \cdot \frac{\partial U_1}{\partial \lambda} - \frac{\partial U_2}{\partial \lambda} \frac{\partial U_1}{\partial p})} \quad p = p_{j-1}, \lambda = \lambda_{j-1} \quad /29/$$

Для первой итерации выражения /23/ вычисляются в точке $p_0 = p_0^{N,L,m}(R_i)$, $\lambda_0 = \lambda_0^{N,L,m}(R_i)$, а для последующей (j+1)-ой - в точке $p_j = p_{j-1} + \Delta p_j$; $\lambda_j = \lambda_{j-1} + \Delta \lambda_j$; $j=1, 2, 3 \dots$

Если же для некоторой (k+1)-ой итерации (k=0,1,2...) λ_k, p_k оказываются такими, что функционал $F(p_k, \lambda_k)$ не меньше, чем $F(p_{k-1}, \lambda_{k-1})$, то для этой итерации λ_k, p_k полагаются равными

$$\lambda_k = \lambda_{k-1} + \alpha \cdot \Delta \lambda_k ; \quad p_k = p_{k-1} + \alpha \cdot \Delta p_k ; \quad /30/$$

где α последовательно подбирается равным какой-либо из величин $(1, \beta, \beta^2, \dots, \beta^n, \alpha_{\min})$, пока функционал $F(p_k, \lambda_k)$ не будет меньше $F(p_{k-1}, \lambda_{k-1})$. Значения β и α_{\min} задаются при обращении к программе.

$$0 < \beta \leq 1 ; \quad 0 < \alpha \leq \beta ;$$

Далее процесс итерирования продолжается до тех пор, пока не будет удовлетворяться условие:

$$\max \left(\frac{|U_1|}{|\lambda \frac{\partial U_1}{\partial \lambda}| + |p \frac{\partial U_1}{\partial p}|}, \frac{|U_2|}{|\lambda \frac{\partial U_2}{\partial \lambda}| + |p \frac{\partial U_2}{\partial p}|} \right) \leq \tilde{\epsilon}, \quad /31/$$

где $\tilde{\epsilon}$ - требуемая точность вычислений, которая задается во входных данных.

Как показывает опыт работы с описываемой здесь программой, процесс минимизации с используемым выбором $\lambda_0, p_0, U_1, U_2, \tilde{U}_2$ сходится в большинстве случаев даже при достаточно большом шаге вычисления по R.

Например, для $1s\sigma$ и $2p\sigma$ состояний при $Z_1=36, Z_2=41$ можно взять $R=0,01(0,01)0,1(0,1)1,5(0,5)2$, или даже $R=0,01(0,01)0,1(1,0)3$, а при $Z_1=Z_2=1$ /для $1s\sigma, 2p\sigma$ и прочих состояний/ $R=0,5(0,5)30$, и получить результаты с требуемой точностью, например, с $\tilde{\epsilon} = 10^{-12}$.

Однако задание слишком большой величины ΔR_0 во входных данных может привести к тому, что процесс минимизации при этом ΔR_0 и при требуемой точности $\tilde{\epsilon}$ может не сойтись. В таком случае программа автоматически уменьшает шаг ΔR и подбирает его таким образом, чтобы была достигнута сходимость и чтобы заданная точность вычислений выполнялась. ΔR при этом полагается равным $\Delta R = \mu \cdot \Delta R_0$, где

$$\mu = 1, \nu, \nu^2, \dots, \nu^n, \mu_{\min} ; \quad 0 < \nu \leq 1 ; \quad 0 < \mu_{\min} \leq \nu .$$

Множитель ν , режущий шаг, а также величина μ_{\min} задаются во входных данных. Результаты вычислений при таких дроблениях R можно по желанию печатать. Для контроля вычислений вместе с результатами программа печатает также асимптотические значения $\lambda_{\text{асимп}}$ и $E_{\text{асимп}}$

при $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$. При $R \sqrt{\frac{Z_1 Z_2}{N}} \leq 1$ эти значения вычисляются

по формулам /24/, а при всех остальных R - по формулам /119/ и /128/ для асимптотических значений λ, E при $R \rightarrow \infty$, приведенным в работе /7/ вплоть до членов порядка $1/R^6$. Ввиду громоздкости эти формулы здесь не приводятся.

Если требуется знание производных $\frac{\partial \lambda}{\partial R}, \frac{\partial p}{\partial R}, \frac{\partial E}{\partial R}$,

то программа определяет эти величины с помощью дифференцирования цепных дробей $U_1, U_2, (\tilde{U}_2)$. Рассматривая λ, p , как неявные функции R, получаем

$$\frac{\partial \lambda}{\partial R} = \frac{(\frac{\partial U_2}{\partial R} \frac{\partial U_1}{\partial p} - \frac{\partial U_1}{\partial R} \frac{\partial U_2}{\partial p})}{(\frac{\partial U_2}{\partial \lambda} \frac{\partial U_1}{\partial p} - \frac{\partial U_1}{\partial \lambda} \frac{\partial U_2}{\partial p})};$$

$$\frac{\partial p}{\partial R} = \frac{\left(\frac{\partial U_1}{\partial R} \frac{\partial U_2}{\partial \lambda} - \frac{\partial U_2}{\partial R} \frac{\partial U_1}{\partial \lambda} \right)}{\left(\frac{\partial U_2}{\partial \lambda} \frac{\partial U_1}{\partial p} - \frac{\partial U_1}{\partial \lambda} \frac{\partial U_2}{\partial p} \right)}; \quad /32/$$

$$\frac{\partial E}{\partial R} = \frac{2 \cdot E}{R} \left(\frac{R}{p} \cdot \frac{\partial p}{\partial R} - 1 \right);$$

Поскольку производные $\frac{\partial U_1}{\partial \lambda}, \frac{\partial U_1}{\partial p}, \frac{\partial U_2}{\partial \lambda}, \frac{\partial U_2}{\partial p}, \left(\frac{\partial \tilde{U}_2}{\partial \lambda}, \frac{\partial \tilde{U}_2}{\partial p} \right)$ вычисляются в процессе минимизации /23/, то для определения $\frac{\partial \lambda}{\partial R}, \frac{\partial p}{\partial R}$ необходимо лишь вычислить $\frac{\partial U_1}{\partial R}, \frac{\partial U_2}{\partial R}$. Заметим, что $\frac{\partial \tilde{U}_2}{\partial R} = 0$.

После определения собственных значений λ, p программа вычисляет коэффициенты A_ℓ по рекуррентным формулам /10/, а затем вычисляет функцию $F(\xi)$ по формуле /6/. Суммирование ряда /6/ производится до тех пор, пока не будет выполняться условие:

$$\left| A_n \left(\frac{\xi-1}{\xi+1} \right)^n \right| \leq \epsilon \quad \xi \left| \sum_{\ell=0}^n A_\ell \left(\frac{\xi-1}{\xi+1} \right)^\ell \right|, \quad /33/$$

где ϵ_ξ - требуемая точность вычисления функции $F(\xi)$. Для определения функции $\Phi(\eta)$ используются разложения /9,14,15/:

$$\Phi(\eta) = e^{-p(1-\eta)} \sum_{\ell=0}^{L_1} \tilde{A}_\ell (1-\eta)^\ell \quad \text{при } 0 \leq \eta \leq 1$$

$$\Phi(\eta) = C \cdot e^{-p(1+\eta)} \sum_{\ell=0}^{L_2} \tilde{A}_\ell (1+\eta)^\ell \quad \text{при } -1 \leq \eta \leq 0. \quad /34/$$

Коэффициенты \tilde{A}_ℓ удовлетворяют соотношениям:

$$\tilde{A}_{\ell+1} \bar{\alpha}_\ell + \tilde{A}_{\ell-1} \bar{\gamma}_\ell + \tilde{A}_\ell \bar{\beta}_\ell = 0; \quad \tilde{A}_{-1} = 0; \quad \tilde{A}_0 = 1.$$

$$\bar{\alpha}_\ell = 2(\ell+1)(\ell+m+1); \quad \bar{\gamma}_\ell = -b+2p(\ell+m); \quad /35/$$

$$\bar{\beta}_\ell = -(\lambda-b+\ell(\ell+1)-(2\ell+m+1)(2p+m)).$$

Коэффициенты \tilde{A}_ℓ равны: $\tilde{A}_\ell = \tilde{A}_\ell^{(-b)}$. Константа C определяется из соотношения:

$$C = (-1)^{L-m} \left| \frac{\sum_{\ell=0}^{L_1} \tilde{A}_\ell}{\sum_{\ell=0}^{L_2} \tilde{A}_\ell} \right| \quad /36/$$

Числа L_1, L_2 определяются условиями:

$$|\tilde{A}_{L_1}| \leq \epsilon_\eta \left| \sum_{\ell=0}^{L_1} \tilde{A}_\ell \right|; \quad |\tilde{A}_{L_2}| \leq \epsilon_\eta \left| \sum_{\ell=0}^{L_2} \tilde{A}_\ell \right|; \quad L_1, L_2 \geq 20, \quad /37/$$

где ϵ_η - требуемая точность вычисления функции $\Phi(\eta)$. Вычисленные таким образом функции $\phi_i = N_i F(\xi) \cdot \Phi(\eta)$ удовлетворяют условию нормировки:

$$\frac{\pi R^3}{4} \cdot N_i \cdot N_j \int_{-1}^1 d\xi \int_{-1}^1 d\eta (\xi^2 - \eta^2) \phi_i \phi_j = \delta_{ij}. \quad /38/$$

Нормирующие множители N_i равны

$$N_i = 1 / \sqrt{\frac{\pi R^3}{4} \int_{-1}^1 d\xi \int_{-1}^1 d\eta (\xi^2 - \eta^2) \phi_i^2}. \quad /39/$$

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные значения $A = \lambda - p^2$, $\tilde{E} = -\frac{2p^2}{R^2} + \frac{Z_1 Z_2}{R}$ при

$Z_1 = Z_2 = 1$ совпадают с соответствующими значениями, опубликованными в работах^{/18/} с заданной там точностью.

При $Z_1 = 1, Z_2 = 2$ λ, E для $2p\sigma, 2s\sigma$ состояний совпадают с аналогичными значениями, полученными для этих случаев в работе^{/15/}.

С помощью данной программы вычислены собственные значения нижних 20 уровней для $Z_1 = 36, Z_2 = 41$; $Z_1 = 28, Z_2 = 41$; $Z_1 = 41, Z_2 = 49$; $Z_1 = 35, Z_2 = 40$; $Z_1 = Z_2 = 28, 41 \dots$ при $R = 0,0001 \div 75$.

Вычислены также соответствующие собственные функции $F(\xi), \Phi(\eta)$ для этих Z_1, Z_2 при некоторых частных значениях R . Для иллюстраций часть результатов для $Z_1 = 28, 36, Z_2 = 41$ приводится в настоящей работе в виде графиков.

Время счета с помощью представленной здесь программы зависит от задаваемой точности вычислений $\tilde{\epsilon}$ и от шага ΔR_0 . Например, на машине CDC-6500 при $Z_1 = 41, Z_2 = 49$ программа вычисляет 30 термов $R = 0,01 (0,01) 0,1 (0,05) 1,5 (0,1) 2$ с точностью $\tilde{\epsilon} = 10^{-12}$ за 396 с. При $Z_1 = Z_2 = 1, \tilde{\epsilon} = 10^{-12}$ программа вычисляет 18 термов $R = 0,5 (0,5) 31$, за 192 с. Время счета одного терма $R = 0,025 (0,025) 21$, при $Z_1 = 1, Z_2 = 2$ и $\epsilon = 10^{-7}$ составляет 84 с.

Выражаю глубокую признательность Я.А.Сморозинскому за стимулирующие обсуждения и помощь при изучении задачи двух центров.

Благодарю Л.И.Пономарева и Т.П.Пузынину за предоставленную возможность работать с программой "TERMN" и за полезные замечания; П. Гиппнера, К. - Г.Кауна, П. Манфраса, Б.Франка - за сотрудничество и обсуждение результатов; У.Брухертсайфер - за построение графиков.

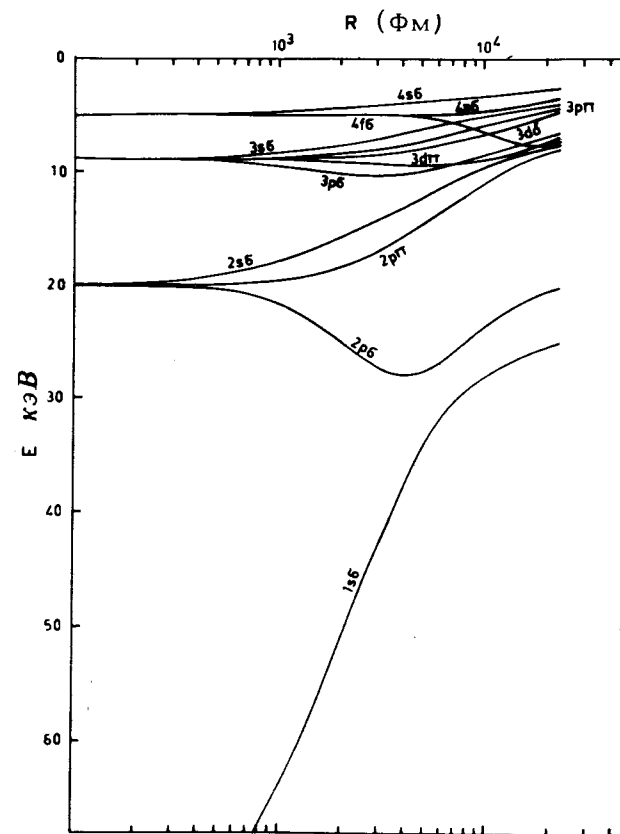


Рис. 1. Зависимость E от R для $Z_1 = 36, Z_2 = 41$. E дано в кэВ, R дано в фм.

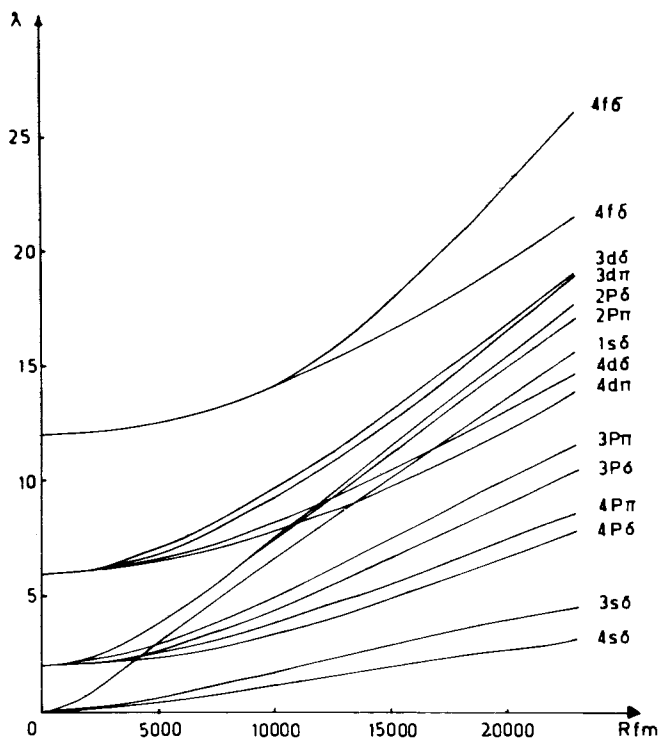


Рис. 2. Зависимость λ от R для $Z_1=36, Z_2=41$. R дано в Φ_m .

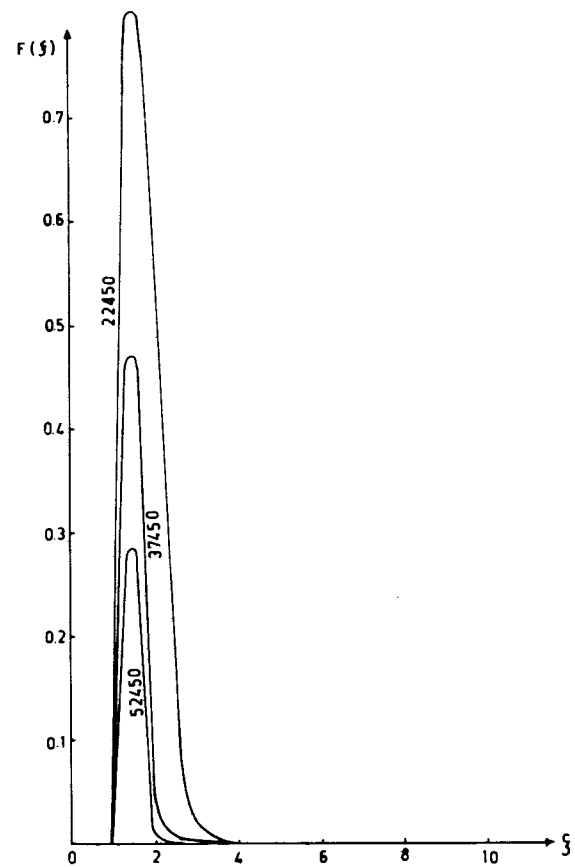


Рис. 3. Функция $F(\xi)$ при $R=22450\Phi_m, R=37450\Phi_m, R=52450\Phi_m$; $4f_{\pi}$ - состояние; $Z_1=36, Z_2=41$.

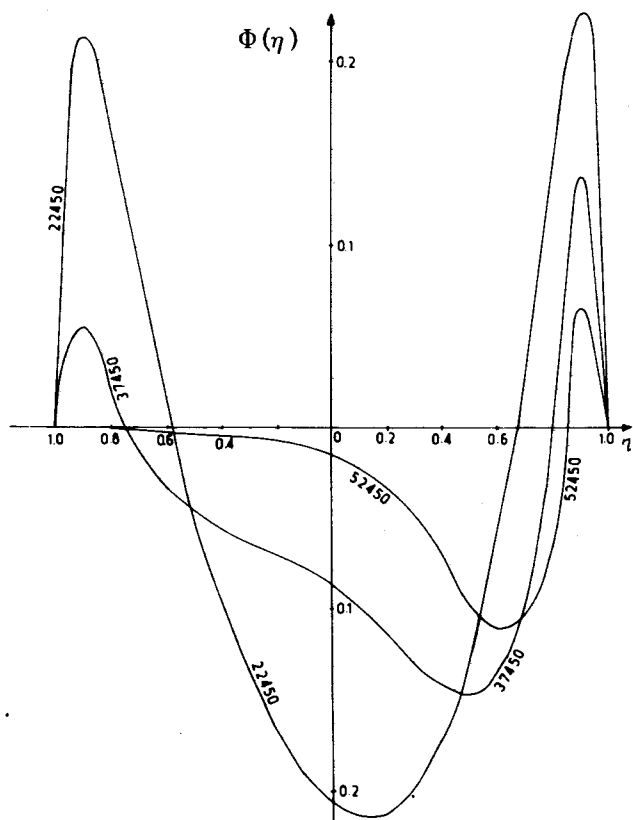


Рис. 4. Функция $\Phi(\eta)$ при $R=22450 \text{ Фм}$, $R=37450 \text{ Фм}$, $R=52450 \text{ Фм}$, $4f_{\pi}$ - состояние; $Z_1=36$, $Z_2=41$.

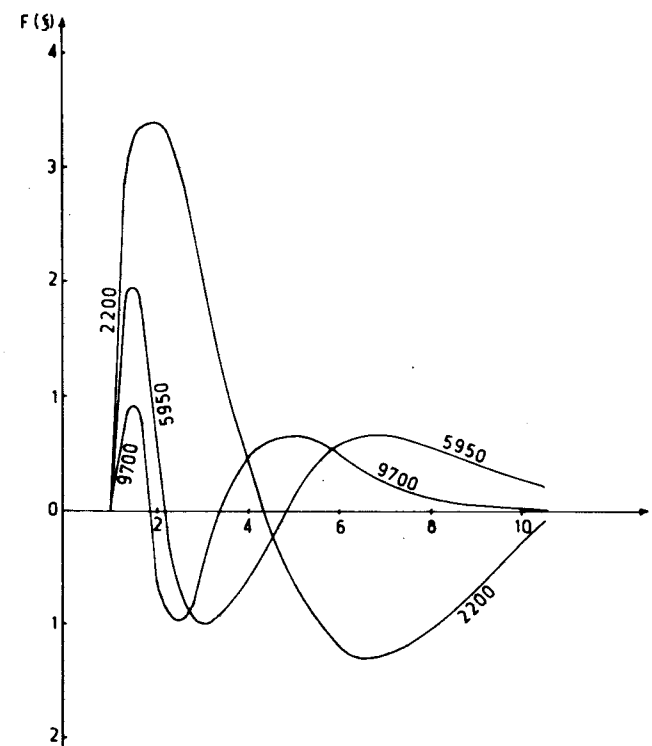


Рис. 5. Функция $F(\xi)$ при $R=2200 \text{ Фм}$; $R=5950 \text{ Фм}$; $R=9700 \text{ Фм}$, 4π - состояние; $Z_1=28$, $Z_2=41$.

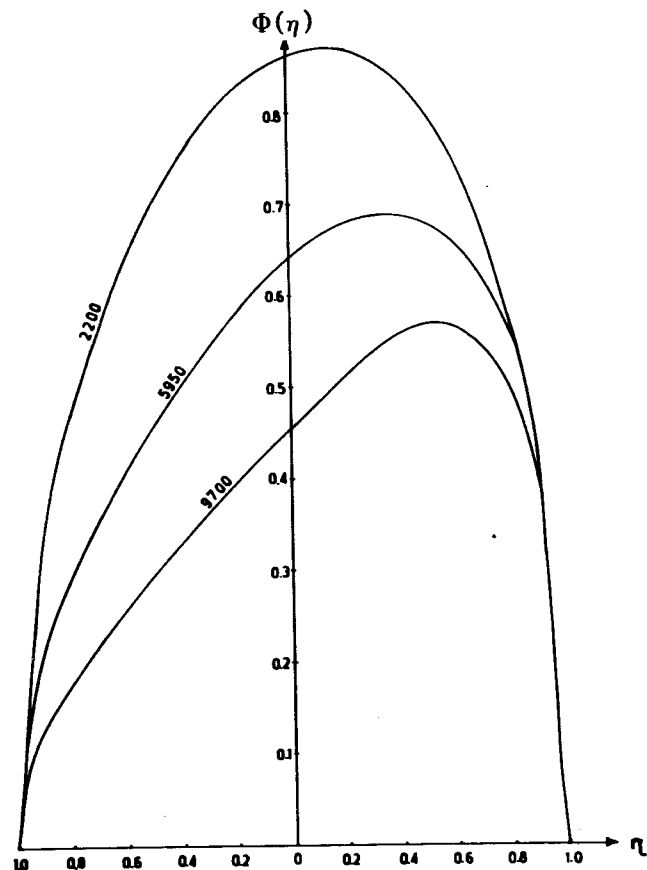


Рис. 6. Функция $\Phi(\eta)$ при $R = 2200 \text{ Фм}$, $R = 5950 \text{ Фм}$, $R = 9700 \text{ Фм}$ $4\pi\pi$ - состояние; $Z_1 = 28$, $Z_2 = 41$.

ЛИТЕРАТУРА

1. W. Frank, P. Gippner, K.-H. Kaun, P. Manfrass, Yu. P. Tretyakov. JINR, E7-9427, Dubna, 1975.
2. P. Gippner, K.-H. Kaun, F. Stary, W. Schulze, Yu. P. Tretyakov. JINR, E7-7636, Dubna, 1973.
3. W. Frank, P. Gippner, K.-H. Kaun, H. Sodan, W. Schulze, Yu. P. Tretyakov. JINR, E7-8616, Dubna, 1975.

4. W. Frank, P. Gippner, K.-H. Kaun, H. Sodan, Yu. P. Tretyakov. JINR, E7-9029, Dubna, 1975.
5. J. S. Greenberg, C. K. Davis, P. Vincent. Phys. Rev. Lett., 33, 473 /1974/.
6. W. E. Meyerhof, T. K. Saylor, S. M. Lazarus, W. A. Little, B. B. Triplet. Phys. Rev. Lett., 32, 1279 /1974/.
7. J. D. Power. Phil. Trans. Roy. Soc. Lond., A274, 663 /1973/.
8. С. С. Герштейн, В. Д. Кривченков. ЖЭТФ, 40, 1491 /1961/.
9. W. G. Baber, H. R. Wasse. Proc. Camb. Phys. Soc., 31, 564 /1938/.
10. G. Jaffe. Zs. Phys., 87, 535 /1934/.
11. D. R. Bates, K. Ledsham, A. L. Stewart. Phil. Trans. Roy. Soc. Lond., A246, 215 /1953/.
12. D. R. Bates, T. R. Carson. Proc. Roy. Soc., A234, 207 /1956/.
13. K. Helfrich, H. Hartmann. Theoret. Chim. Acta. (Berl.), 3, 21-30 /1965/; 16, 263 /1970/; 21, 381 /1971/; 21, 44 /1971/.
14. Л. И. Пономарев, Т. П. Пузынина. ЖЭТФ, 52, 1273 /1967/; ЖВМ и МФ, 8, 1256 /1968/; Препринты ОИЯИ, Р4-3175, Р4-3405, Дубна, 1967; Р4-3011, Дубна, 1966; Р2-3009, Р2-3012, Дубна, 1966.
15. Л. И. Пономарев, Т. П. Пузынина. Препринт ОИЯИ, Р4-5040, Дубна, 1970.
16. G. Hunter, H. O. Pritchard. J. Chem. Phys., 46, 2146 /1967/.
17. R. F. Wallis, H. M. Hulburt. J. Chem. Phys., 22, 774 /1954/.
18. J. M. Peek. J. Chem. Phys., 43, 3004 /1965/; Sandia Corporation Report SC-RR-65-77, TID-4500 (39th Ed.), UC-34 /1965/; Atomic Data, 2, 171-209 /1971/.
19. С. Н. Соколов, И. Н. Силин. Препринт ОИЯИ, Д-810, Дубна, 1961.
20. H. S. Wall. Continued Fractions, New York, Pergamon Press, 1948.
21. S. K. Chakravatry. Phil. Mag., 28, 423 /1939/.

Рукопись поступила в издательский отдел
2 ноября 1976 года.