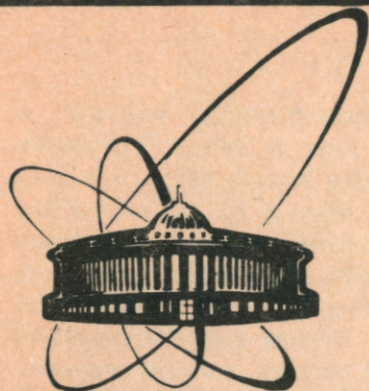


89-427



СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

А 16

P11-89-427

А.Г.Абрашкевич *, Д.Г.Абрашкевич*,
С.И.Виницкий, И.В.Пузынин

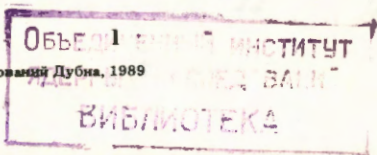
ВСАТОМ - ПАКЕТ ПРОГРАММ
ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ
И ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ГЕЛИЕПОДОБНЫХ СИСТЕМ
С УЧЕТОМ ИЗОТОПИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ

*Ужгородский государственный университет

1989

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение двухэлектронных систем, представляющих собой квантовомеханическую систему из трех частиц, описываемых уравнением Шредингера, является важной задачей атомной физики [1-14]. Сложность математической постановки для решения кулоновской задачи трех тел, связанная с наличием особых точек дифференциального уравнения Шредингера с переменными коэффициентами, областью изменения независимых переменных, сложным видом граничных условий, обеспечивающих условия ограниченности соответствующих решений, по существу, исключает возможность аналитического решения. Наличие большого числа экспериментальных данных для гелиеподобных систем [3, 6, 11] позволяет проводить сравнение теоретических результатов, полученных в рамках различных подходов и приближений, с экспериментом. Двухэлектронные системы являются простейшим многоэлектронным атомом или ионом, для которого возможно такое сравнение. Этим объясняется использование гелиеподобных систем в качестве тестовых для большинства теоретических подходов. Интерес к гелиеподобным системам связан также с наличием в атомах сильных электронных корреляций. Это требует отказа от концепции независимых электронов, широко распространенной в атомной физике. Для объяснения спектров дважды возбужденных состояний (DES) гелиеподобных систем необходимы новые подходы, позволяющие корректно учитывать корреляции электронов в атомах. Одним из них является гиперсферический адиабатический (HSA) подход [11-15]. Большинство приложений HSA-подхода связано с использованием адиабатического приближения, в котором пренебрегают связью каналов в системе радиальных уравнений. Использование многоканального приближения HSA-подхода позволило существенно повысить по сравнению с адиабатическим приближением точность вычисления спектральных характеристик двухэлектронных атомов и ионов (см., напр. [16-22]). В рамках требуемой точности ($\approx 10^{-4}$ а.е.) необходимо учитывать изотопические эффекты, связанные с конечной массой ядра. В недавней работе [23] было введено HSA-представление в барисферических координатах [24, 25], в которых в исходной постановке задачи точно учитываются изотопические и корреляционные эффекты в атоме. Кроме того, был разработан пакет программ HSAATOM [26] для вычисления спектров двухэлектронных систем в рамках HSA-представления в гелиоцентрических координатах (в приближении бесконечно тяжелого ядра). С его помощью были выполнены многоканальные расчеты [19] энергии основных состояний гелиеподобных систем с точностью $\sim 10^{-3}$ а.е. Для повышения точности расчетов и уменьшения требуемого объема оперативной памяти ЭВМ в работе [27]



были предложены схемы метода конечных элементов повышенного порядка точности. Благодаря этому были выполнены многоканальные расчеты DES He и H с точностью $\sim 10^{-4}$ а.е. [21,22]. В данной работе представлены вычислительная схема и пакет программ для вычисления на базе разработанных сеточных алгоритмов [26,27] спектров двухэлектронных систем с учетом изотопических эффектов в HSA-подходе. Пакет реализован на ЭВМ ЕС-1061.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

2.1. Бариецентрические координаты

Рассмотрим систему трех кулоновских частиц a, b и c с зарядами Z_a, Z_b, Z_c и массами $M_c > M_a \gg M_b$. Назовем частицы a и b электронами, а частицу c - ядром. Уравнение Шредингера для двухэлектронного атома в бариецентрической системе координат [24,25]

$$\begin{pmatrix} \vec{S}_a \\ \vec{S}_b \\ \vec{R}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{d_c M_a + M_b}{M_a + M_b} & \frac{d_c M_b - M_s}{M_a + M_b} & -d_c \\ \frac{d_c M_a - M_a}{M_a + M_b} & \frac{d_c M_s + M_s}{M_a + M_b} & -d_c \\ d_a^2 & d_s^2 & d_c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{R}_a \\ \vec{R}_b \\ \vec{R}_c \end{pmatrix} \quad (1)$$

имеет вид ($\ell = \hbar = m_e = 1$):

$$\hat{H} \Psi = \mathcal{E} \Psi, \quad \hat{H} = -(2M_0)^{-1} \Delta_{\vec{R}_0} + \hat{H}_B, \quad (2)$$

где $\hat{H}_B = T + \gamma_B$, $T = -(2M_a)^{-1} \Delta_{\vec{S}_a} - (2M_b)^{-1} \Delta_{\vec{S}_b}$, (3)

$$\gamma_B = - \frac{Z_a Z_c}{|(1+\gamma_a)\vec{S}_a + \gamma_s \vec{S}_s|} - \frac{Z_b Z_c}{|(1+\gamma_b)\vec{S}_b + \gamma_a \vec{S}_a|} + \frac{Z_a Z_b}{|\vec{S}_a - \vec{S}_b|} \quad (4)$$

Здесь $\Delta_{\vec{R}_p}$ - оператор Лапласа в \mathbb{R}^3 , $\vec{R}_p \in \mathbb{R}^3$ - радиус-вектор p -ой частицы,

$$d_p = (M_p/M_0)^{1/2}, \quad M_0 = M_a + M_b + M_c,$$

$$\vec{R}_p = M_0^{-1} \sum_p M_p \vec{R}_p, \quad p = a, b, c.$$

При переходе в систему центра инерции имеем

$$\hat{H}_B \Psi = E \Psi \quad (5)$$

2.2. Гиперсферический адиабатический базис

Переход от бариецентрических координат к гиперсферическим осуществляется с помощью замены

$$S_a = M_a^{-1/2} \mathcal{R} \cos d, \quad S_b = M_b^{-1/2} \mathcal{R} \sin d. \quad (6)$$

В результате гамильтониан \hat{H}_B приобретает вид

$$\hat{H}_B = - \frac{1}{2\mathcal{R}^2} \frac{\partial}{\partial \mathcal{R}} \mathcal{R}^5 \frac{\partial}{\partial \mathcal{R}} + h_B(\mathcal{R}) \quad (7)$$

Здесь $h_B(\mathcal{R})$ - угловая часть гамильтониана \hat{H}_B , зависящая параметрически от \mathcal{R} :

$$h_B = - \frac{1}{2\mathcal{R}^2} \left[\sin^{-2} d \frac{\partial}{\partial d} \sin^2 d \frac{\partial}{\partial d} - \frac{\vec{L}_a^2}{\cos^2 d} - \frac{\vec{L}_b^2}{\sin^2 d} \right] + V_B(d, v_{al}, \mathcal{R}), \quad (8)$$

где

$$V_B \equiv V_B(d, v_{al}, \mathcal{R}) = \mathcal{R}^{-1} \tilde{V}_B(d, v_{al})$$

- потенциальная энергия, \vec{L}_p - оператор орбитального момента p -го электрона, $\cos v_{al} = (\vec{S}_a \cdot \vec{S}_b)$. Оператор V_B приведен в работе [23].

Определим ортонормированный HSA-базис $\{\Phi_j\}_{j=1}^{\infty} \in L^2(S^5)$ как полный набор решений спектральной задачи для уравнения

$$h_B(\mathcal{R}) \Phi_j(\Omega; \mathcal{R}) = E_j(\mathcal{R}) \Phi_j(\Omega; \mathcal{R}) \quad (9)$$

Собственные значения (термы) $E_j(\mathcal{R})$ параметрически зависят от гиперрадиуса \mathcal{R} . Парциальный анализ в представлении полного момента осуществляется с помощью разложения HSA-функции $\Phi_j(\Omega; \mathcal{R})$ по биполярным гармоникам $Y_{l_a l_b}^{L M_L}(\hat{S}_a, \hat{S}_b) \in L^2(S^2(\hat{S}_a) \times S^2(\hat{S}_b))$:

$$\Phi_j(\Omega; \mathcal{R}) = (\sin d \cos d)^{-1} \sum_{l_a l_b} \varphi_{l_a l_b}^{(j)}(d; \mathcal{R}) Y_{l_a l_b}^{L M_L}(\hat{S}_a, \hat{S}_b). \quad (10)$$

Подстановка (10) в уравнение (9) и интегрирование по угловым переменным \hat{S}_a и \hat{S}_b приводит к системе обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\left[\frac{d^2}{dd^2} - \frac{l_a(l_a+1)}{\cos^2 d} - \frac{l_b(l_b+1)}{\sin^2 d} - 2E_j(\mathcal{R})\mathcal{R}^2 \right] \varphi_{l_a l_b}^{(j)}(d; \mathcal{R}) + \mathcal{R} \sum_{l'_a l'_b} \langle Y_{l'_a l'_b}^{L M_L}(\hat{S}_a, \hat{S}_b) | \tilde{V}_B(d, v_{al}) | Y_{l_a l_b}^{L M_L}(\hat{S}_a, \hat{S}_b) \rangle \varphi_{l'_a l'_b}^{(j)}(d; \mathcal{R}) = 0. \quad (11)$$

Под символом $\langle \cdot | \cdot \rangle$ здесь понимается интегрирование по четырем переменным \hat{S}_a, \hat{S}_b . Система уравнений (11) дополняется граничными условиями [15]

$$\varphi_{l_a l_b}^{(j)}(0; \mathcal{R}) = 0,$$

$$\begin{aligned} \varphi_{l_a l_b}^{(j)}(d; \mathcal{R}) / \Big|_{d=\pi/4} &= (-1)^{L+S+l_a+l_b} \varphi_{l_b l_a}^{(j)}(\pi/2-d; \mathcal{R}) / \Big|_{d=\pi/4}, \\ \frac{d\varphi_{l_a l_b}^{(j)}(d; \mathcal{R})}{dd} \Big|_{d=\pi/4} &= (-1)^{L+S+l_a+l_b+1} \frac{d\varphi_{l_b l_a}^{(j)}(\pi/2-d; \mathcal{R})}{dd} \Big|_{d=\pi/4}. \end{aligned} \quad (12)$$

В конкретных расчетах ограничиваются первыми $N_\alpha = N(l_\alpha, l_\beta)$ членами в разложении (10), что приводит к краевой задаче (11)-(12) для системы N_α дифференциальных уравнений.

2.3. Система радиальных уравнений

NSA-разложение для полной волновой функции $\Psi(\rho, \Omega)$ имеет вид

$$\Psi(\rho, \Omega) = \rho^{-5/2} \sum_j X_j(\rho) \Phi_j(\Omega; \rho). \quad (13)$$

Подстановка (13) в уравнение Шредингера (5) и усреднение по NSA-базису приводит к системе обыкновенных дифференциальных уравнений для радиальных функций $\vec{X}(\rho) = \{X_j\}_{j=1}^{N_\alpha}$:

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} \hat{I} + \hat{V}(\rho)\right] \vec{X}(\rho) + \frac{d}{d\rho} [\hat{Q}(\rho) \vec{X}(\rho)] + \hat{Q}(\rho) \frac{d\vec{X}(\rho)}{d\rho} = 2E \vec{X}(\rho), \quad (14)$$

где матричные элементы V_{ij} и Q_{ij} определяются соотношениями

$$V_{ij}(\rho) = -1/4 \rho^{-2} \delta_{ij} + E_j(\rho) \delta_{ij} + H_{ij}(\rho), \quad (15)$$

$$H_{ij}(\rho) = H_{ji}(\rho) = \left\langle \frac{d\Phi_i(\Omega; \rho)}{d\rho} \left| \frac{d\Phi_j(\Omega; \rho)}{d\rho} \right. \right\rangle, \quad (16)$$

$$Q_{ij}(\rho) = -Q_{ji}(\rho) = - \left\langle \Phi_i(\Omega; \rho) \left| \frac{d\Phi_j(\Omega; \rho)}{d\rho} \right. \right\rangle, \quad (17)$$

а \hat{I} - единичная матрица. Символ $\langle \cdot | \cdot \rangle$ означает интегрирование по переменной Ω и суммирование по парам (l_α, l_β) . Волновые функции удовлетворяют граничным условиям

$$X_j(0) = X_j(\infty) = 0, \quad j = 1, 2, \dots \quad (18)$$

При численном решении системы (14) ограничиваются конечным числом уравнений N_α и заменяют полубесконечный интервал по переменной ρ конечным $\rho \in [0, \rho_{max}]$.

3. МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

3.1. Численное решение спектральной задачи (11), (12)

Решение задачи Штурма-Лиувилля (11), (12) осуществляется методом конечных разностей (МКР). Перепишем (11), (12) в виде

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} \hat{I} + \hat{U}(x)\right] \vec{Y}(x) = \lambda \vec{Y}(x), \quad (19)$$

$$\vec{Y}(0) = \vec{Y}(\pi/4) = 0. \quad (20)$$

Здесь $x \equiv \rho$, $x \in [0, \pi/4]$, $\vec{Y}(x) = \{y_1(x), y_2(x), \dots, y_{N_\alpha}(x)\} \equiv \vec{\Psi}(x; \rho)$, $\lambda = -2 E_j(\rho) \rho^2$, $\hat{U}(x)$ - матрица потенциалов размерности $N_\alpha \times N_\alpha$. Граничные условия (12) реализуются методом штрафа [28] и

не меняют общей схемы решения. Введем на отрезке $[0, \pi/4]$ равномерную разностную сетку: $\omega_n = \{x_k = kh, k=0, 1, \dots, n\}$, а также обозначения: $Y_k(x) = \vec{Y}(x_k)$, $U_k(x) = U(x_k)$, $h = \pi/4n$, $k=0, 1, \dots, n$. Заменяем задачу (19), (20) разностной задачей второго порядка точности [29]:

$$(Y_{k-1} - 2Y_k + Y_{k+1})/h + h U_k Y_k = \lambda h Y_k, \quad (21)$$

$$Y_0 = Y_n = 0, \quad k = 1, 2, \dots, n-1.$$

Выражение (21) перепишем в виде

$$A^k X = \lambda B^k X, \quad (22)$$

где X - $N_\alpha(n-1)$ -мерный вектор с компонентами

$$X_\ell = y_i(x_k), \quad \ell = (k-1)n + i, \quad k = 1, 2, \dots, n-1, \quad i = 1, 2, \dots, N_\alpha,$$

A^k - квадратная симметричная матрица, имеющая ленточную структуру с максимальной шириной ленты $2N_\alpha + 1$, а матрица B^k - диагональная с элементами вида $B_{\ell\ell} = h$, $\ell = (k-1)n + i$, $i = 1, 2, \dots, N_\alpha$, $k = 1, 2, \dots, n-1$. Для нахождения первых p собственных значений и собственных функций обобщенной алгебраической проблемы на собственные значения (22) используется метод итерации подпространств [28].

3.2. Численное решение спектральной задачи (14), (18)

Для численного решения задачи Штурма-Лиувилля (14), (18) используются схемы метода конечных элементов (МКЭ) повышенного порядка точности [27]. Предполагается, что коэффициенты уравнения (14) обеспечивают необходимую гладкость решения. Вариационный функционал Рэлея-Ритца для уравнения (14) с соответствующими граничными условиями (18) имеет вид (штрих означает дифференцирование по ρ):

$$R(X) = \left\{ \sum_i \sum_j \int_0^{\rho_{max}} [X_i' X_j' \delta_{ij} + X_i V_{ij} X_j + X_i (Q_{ij} X_j) + X_i Q_{ij} X_j'] d\rho \right\} \left\{ \sum_i \sum_j \int_0^{\rho_{max}} X_i X_j \delta_{ij} d\rho \right\}^{-1}. \quad (23)$$

Вычислительные схемы МКЭ выводятся из вариационного функционала (23).

В данной работе используются изопараметрические лагранжевы элементы $\{z_i^k(\eta)\}_{i=1}^k$ степени k , $k=1, 2, 3, 4, 5$, которые определяются следующим образом. На интервале заданы точки $\eta_i^k = -1 + 2i/k$, $i=0, 1, \dots, k$. Функции $z_i^k(\eta)$ определяются из условий

$$z_i^k(\eta_j^k) = \delta_{ij}, \quad i, j = 0, 1, \dots, k.$$

Покроем интервал $\Delta = [a, b]$ системой подинтервалов $\Delta_j = [x_{j-1}, x_j]$, $\Delta = \bigcup \Delta_j$, $x \equiv \rho$. Конечноэлементная сетка ω^k состоит из точек x_0, x_1, \dots, x_n и точек

$$x_{j,i}^k = x_{j-1} + 0.5(x_j - x_{j-1})(1 + \eta_i^k), \quad i = 1, 2, \dots, k-1, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

В каждой точке $x_{j,i}^k$ сетки определим функцию

$$\phi_l^k(x) = \begin{cases} z_{j,i}^k(\eta), & x = x_{j-1} + \frac{h_j}{2}(1-\eta), \quad |\eta| \leq 1 \\ 0, & x \in \Delta_j, \end{cases} \quad (24)$$

$$i = 1, 2, \dots, k-1, \quad l = (j-1)k + i, \quad h_j = x_j - x_{j-1}.$$

Эти функции в точках x_0, x_1, \dots, x_n имеют вид

$$\phi_l^k(x) = \begin{cases} z_{j,k}^k(\eta), & x = x_{j-1} + \frac{h_j}{2}(1+\eta), \quad |\eta| \leq 1, \\ z_{j+1,0}^k(\eta), & x = x_j + \frac{h_{j+1}}{2}(1+\eta), \quad |\eta| \leq 1, \\ 0, & x \in \Delta_j \cup \Delta_{j+1}, \quad l = (j-1)k. \end{cases} \quad (25)$$

Функции $\{\phi_l^k(x)\}_{l=0}^{L=nk+1}$ образуют базис в пространстве полиномов степени k . Представим решение $X(x)$ в виде $X(x) = \sum_{l=0}^L y_l \phi_l^k(x)$ и подставим это разложение в функционал (23). Из условия минимума этого функционала получаем, что вектор $\bar{Y} = (y_0, y_1, \dots, y_L)^T$ является собственным вектором обобщенной алгебраической проблемы на собственные значения

$$A^k Y = \lambda E B^k Y. \quad (26)$$

Матрицы A^k и B^k симметричны и имеют ленточную структуру, B^k - положительно определена. Они имеют вид

$$A^k = \sum_{j=1}^n \alpha_j^k, \quad B^k = \sum_{j=1}^n \beta_j^k,$$

где локальные на элементе Δ_j матрицы жесткости α_j^k и массы β_j^k вычисляются по формулам

$$(\alpha_j^k)_{pq}^{ii} = \int_{-1}^1 \left\{ \frac{4}{h_j^2} (z_{j,p}^k)' (z_{j,q}^k)' + \tilde{V}_{ii} z_{j,p}^k z_{j,q}^k \right\} \frac{h_j}{2} d\eta, \quad (27)$$

$$(\alpha_j^k)_{pq}^{ii'} = \int_{-1}^1 \left\{ \frac{h_j}{2} \tilde{V}_{ii'} z_{j,p}^k z_{j,q}^k + \sum_{s=0}^k Q_{ii'}^s z_{j,p}^k [z_{j,s}^k (z_{j,q}^k)' + (z_{j,s}^k)' z_{j,q}^k] \right\} d\eta,$$

$$(\beta_j^k)_{pq} = \int_{-1}^1 z_{j,p}^k z_{j,q}^k \frac{h_j}{2} d\eta, \quad \tilde{V}_{ii'} = \sum_s V_{ii'}^s z_{j,s}^k, \quad (28)$$

$$x = x_{j-1} + \frac{h_j}{2}(1+\eta), \quad p, q, s = 0, 1, \dots, k, \quad i, i' = 1, 2, \dots, nk.$$

Здесь $V_{ii'}^s$ и $Q_{ii'}^s$ - значения матричных элементов $V_{ii'}(\mathcal{R})$ и $Q_{ii'}(\mathcal{R})$ в узлах s элемента Δ_j . Интегралы (27), (28) вычисляются при помощи квадратурных формул Гаусса с $k+1$ узлами.

Для решения задачи (26) использован метод итерации подпространств [28]. Отметим, что для собственных значений E_n и собственных функций y_n выполняются следующие оценки [30, стр. 267, 271]:

$$\begin{aligned} 0 \leq E_n^h - E_n &\leq C(E_n) h^{2k}, \\ \|y_n^h - y_n\|_0 &\leq \tilde{C}(E_n) h^{k+1}, \end{aligned} \quad (29)$$

где h - максимальный шаг конечноэлементной сетки, а n - номер соответствующего решения.

4. ОПИСАНИЕ ПАКЕТА ПРОГРАММ ВСАТОМ

4.1. Структура и общая характеристика пакета

Пакет программ ВСАТОМ предназначен для вычисления уровней энергии и волновых функций трехчастичных атомных систем с учетом изотопических эффектов для произвольных значений полного орбитального момента L , зарядов и масс частиц a, b и c . Пакет написан на языке ФОРТРАН-IV и предназначен для эксплуатации на ЭВМ серии ЕС под управлением операционной системы ОС ЕС. Все вычисления ведутся с двойной точностью. В качестве языка входных данных используется оператор NAMELIST, что позволяет упростить подготовку и модификацию входных данных. Предусмотрены также динамическое распределение памяти и автоматическая генерация конечно-элементной сетки.

Весь процесс решения задачи разбит на три этапа: 1) вычисление термов $E_i(\mathcal{R})$ и собственных функций $\Psi_{LaLz}^{(i)}(\alpha; \mathcal{R})$ и запись их на файл FILE1; 2) чтение данных из файла FILE1, вычисление по формулам (15)-(17) эффективных потенциалов $V_{ij}(\mathcal{R})$ и $Q_{ij}(\mathcal{R})$ и запись их на FILE2; 3) чтение из FILE2 потенциалов $V_{ij}(\mathcal{R})$ и $Q_{ij}(\mathcal{R})$, вычисление уровней энергии и радиальных функций и запись их на FILE3. Для первых двух этапов предусмотрены два режима: а) начало счета; б) продолжение счета. Это позволяет полностью автоматизировать расчет и предусмотреть защиту от непредвиденных сбоев машины.

В соответствии с количеством этапов решения пакет ВСАТОМ состоит из трех программных комплексов: ВСТЕРМ, ВСМАТН и ВСЕВНН. Общая структура пакета и схема обмена файлами приведены на рис. 1.

В программах ВСТЕРМ, ВСМАТН и ВСЕВНН реализовано динамическое распределение памяти. Образец главной программы, входящей в ВСТЕРМ, приведен на рис. 2. Соответствующие главные программы для ВСМАТН и ВСЕВНН имеют аналогичный вид. Смысл параметров МТОГ и IIN объяснен в комментариях. Во всех программах вычисляется и печатается последний адрес массива M. Если он превышает значение МТОГ, то печатается сообщение об ошибке и происходит останов программы. В сообщении указывается недостающая память. В соответствии с ее значением необходимо изменить параметр МТОГ и сделать повторный запуск.

Все файлы, используемые в пакете, должны быть описаны в соответствии с правилами, принятыми в ОС ЕС. В данном пакете для чтения-записи файлов используется бесформатный ввод-вывод. В пакете предусмотрен ряд остановов, которые происходят в следующих случаях:

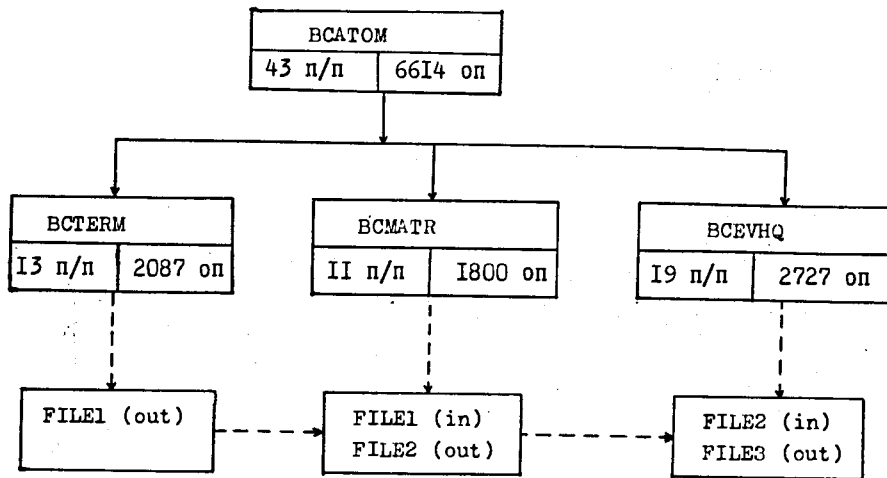


Рис. 1. Общая структура пакета VSATOM и схема обмена файлами

С Следующие две карты используются для определения максимальной
 С размерности MTOT массива M, требуемой для решения задачи. Общая
 С память в килобайтах определяется как
 С $ILAST * 4 / 1024 + 100$,
 С где ILAST - последний использованный адрес в массиве M. Для из-
 С менения максимального размера памяти, необходимой для проведения
 С вычислений, следует изменить значения MTOT и, соответственно, -
 С массива M(MTOT).

DIMENSION M(200000)

MTOT = 200000

С IIN - номер файла, по которому осуществляется ввод
 С данных

IIN = 5

CALL VSTERM (M, MTOT, IIN)

STCP

END

Рис. 2. Образец главной программы комплекса VSTERM

1. Недостаточная размерность массива M.
2. Некорректное задание значений исходных данных задачи.
3. Превышение максимального числа итераций (для VSTERM и VSMATR)
4. Конец счета в автоматическом режиме (для VSTERM и VSMATR)
5. Остановы, предусмотренные в программе SSPACE [28] (для VSTERM и VSEVHQ).

4.2. Программа VSTERM

Комплекс программ VSTERM предназначен для вычисления собственных значений - термов $E_i(\mathcal{Q})$ и собственных функций $\Psi_{i, l, l_i}^{(Q)}(\alpha; \mathcal{Q})$ задачи (I1)-(I2). Решение этой задачи разбито на пять этапов: 1) ввод и обработка данных; 2) генерация конечно-разностной сетки; 3) вычисление матриц A и B, запись их профиля; 4) вычисление заданного числа термов E_i и функций $\Psi_{i, l, l_i}^{(Q)}$; 5) запись результатов счета на файл FILE1. VSTERM состоит из 13 подпрограмм и содержит 2087 операторов. Ниже кратко описаны основные подпрограммы комплекса.

VSTERM - управляет процессом решения задачи (I1)-(I2). В этой подпрограмме осуществляется ввод, обработка и печать начальных данных, формируются квантовые числа для каждого канала, проверяются все флаги.

NSTEP - генерирует конечно-разностную сетку по переменной α .

EIGVNC - формирует матрицы A и B, реализует граничные условия (I2).

VPOG, VRAB - формируют матрицу потенциалов V_B в каждой точке по α

VRAC, VRBC, QANG

CLEBSH - вычисляет коэффициенты Клебша-Гордана.

SIXJS - вычисляет 6J - символы.

SSPACE - решает алгебраическую задачу (22). Состоит из 5 подпрограмм. Описание SSPACE дано в [28].

EVSOLV - для заданного набора значений \mathcal{Q} вычисляет $E_i(\mathcal{Q})$ и $\Psi_{i, l, l_i}^{(Q)}$, осуществляет запись и печать результатов.

Описание входных данных для программы VSTERM начинается с карты №1, предназначенной для идентификации вводимых данных. Формат карты - 8A8:

Переменная	Назначение
TITLE	Заголовок задачи, 64 символа

Группа карт №2 содержит информацию об используемых файлах. Формат группы карт №2 - NAMELIST/FILES/:

& FILES ICUT=, NT18=, NT19=, NT20=, NT21= &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
IOUT	- номер файла, по которому осуществляется вывод информации на печать	6
NT18	- временный рабочий файл	18
NT19	- временный рабочий файл	19
NT20	- в этом файле хранятся текущее значение \mathcal{R} , $E_i(\mathcal{R})$ и $\Psi_{l_a l_b}^{(i)}(\alpha; \mathcal{R})$, используемые в качестве начального приближения в следующей точке по \mathcal{R}	20
NT21	- в этот файл записываются решения задачи (II), (I2) в соответствии с оператором WRITE(NT21)R, NN, NDIM, NWK, NROOT, (E(I), I=1, NROOT), (($\Phi(I, J)$, I=1, NN), J=1, NROOT), где \mathcal{R} - гиперрадиус, NN=NDIM * NGRID, NDIM - число уравнений, NGRID - число узлов сетки, NROOT - число термов, NWK - размерность матрицы A.	21

Группа карт №3 содержит данные, необходимые для решения задачи (II), (I2) в заданном наборе точек по \mathcal{R} . Формат группы карт №3 - NAMELIST/RMESH/:

```
&RMESH IREAD=, IRBEG=, IREND=, NGRID=,
RGRID=, RVALUE=, NRECRO= &END
```

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
IREAD	- задает режимы работы программы: =0 - начало счета. Начальное приближение вырабатывается программой =1 - продолжение счета. Начальное приближение считывается с файла NT20	0
IRBEG	- начальное значение переменной цикла по \mathcal{R}	1
IREND	- конечное значение переменной цикла по \mathcal{R}	1
NGRID	- размерность массива RGRID (не более 25). Значение NGRID всегда нечетно	3
RGRID	- массив данных для разбиения интервала изменения гиперрадиуса $\mathcal{R} \in [\mathcal{R}_{min}, \mathcal{R}_{max}]$ на подинтервалы $[\mathcal{R}_{GRID}(I-1), \mathcal{R}_{GRID}(I+1)]$ с шагом $h_{\mathcal{R}} = \mathcal{R}_{GRID}(I)$ на каждом из подинтервалов. Здесь $\mathcal{R}_{GRID}(1) = \mathcal{R}_{min}$, $\mathcal{R}_{GRID}(NGRID) = \mathcal{R}_{max}$, $2 \leq I < NGRID$ (I - четное).	

RVALUE - значение гиперрадиуса \mathcal{R} , для которого нужно решить задачу (II), (I2). Используется при IREAD=1 и RVALUE > 0

NRECRO - число начальных записей в файле NT21 до начала счета

Группа карт №4 содержит информацию о числе одновременно вычисляемых термов, сдвиге спектра, точности расчета, конечно-разностной сетке, числе итераций. Формат группы карт №4 - NAMELIST/TERMAT/:

```
&TERMAT LMAX=, NROOT=, SHIFT=, RTOL=, NITEM=,
IPRINT=, IPRTFN=, IPRSTP=, NPART=, NP1=, ..., NP5= &END
```

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
LMAX	- максимальное значение орбитальных моментов электронов $l_{max} = \max(l_a, l_b)$	0
NROOT	- число одновременно вычисляемых термов	1
SHIFT	- сдвиг спектра. Вычисляются NROOT термов, ближайших к сдвигу	1.
RTOL	- относительная точность вычислений $E_i(\mathcal{R})$	1.D-8
NITEM	- максимальное число итераций	30
IPRINT	- уровень печати: =0 - минимальный уровень печати. Печатаются входные данные и результаты счета =1 - дополнительно распечатываются матрицы A и B, их профиль и нумерация узлов >1 - расширенная печать (используется при отладке)	0
IPRTFN	- печать собственных функций =0 - печать не производится >0 - печатаются NROOT функций $\Psi_{l_a l_b}^{(i)}$ с шагом IPRSTP	0
IPRSTP	- шаг печати собственных функций $\Psi_{l_a l_b}^{(i)}$	10
NPART	- число подинтервалов в области изменения переменной α ($0 \leq \alpha \leq \pi/4$). $NPART \leq 5$	1
NP1, ..., NP5	- число узлов на каждом из NPART подинтервалов IOO	

Группа карт №5 содержит информацию о рассматриваемой атомной системе. Формат группы карт №5 - NAMELIST/ATMSYS/:

```
&ATMSYS L=, ISPIN=, IPI=, ZA=, ZB=, ZC=,
AMMA=, AMMB=, AMMC=, &END
```

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
L	- полный орбитальный момент системы	0
ISPIN	- полный спиновый момент системы	0
IPI	- четность: $\pi = (-1)^{l_a+l_b}$ =0, если $\pi = 1$ =I, если $\pi = -1$	0
ZA, ZB, ZC	- заряды частиц	-1, -1, +1
AMMA, AMMB,	- массы частиц	1., 1.,
AMMC		1836.1515

Все группы карт читаются из файла с номером IIN. В результате работы программы VSTERM на файл NT21 будут записаны решения задачи (II), (I2) для заданного набора значений гиперрадиуса.

4.3. Программа ВСМАТR

Программа ВСМАТR предназначена для вычисления эффективных потенциалов $V_{ij}(R)$ и $Q_{ij}(R)$. Она состоит из II подпрограмм и содержит 1800 операторов. Ниже дано краткое описание подпрограмм.

ВСМАТR - управляет процессом вычисления эффективных потенциалов. В этой подпрограмме осуществляется ввод, обработка и печать начальных данных, автоматическая генерация квантовых чисел для каждого канала, проверяются флаги.

ВСМАТ - для заданного набора R считывает из файла NT20 термы и волновые функции, формирует матрицы V и Q, записывает их на файл NT21.

ВСРОG - по формулам (I5)-(I7) вычисляет V_{ij}, Q_{ij} в каждой точке по R.

SPLINE - вычисляет коэффициенты кубического интерполяционного сплайна.

SEVAL - вычисляет значение кубического сплайна.

SEVALP - вычисляет значение производной кубического сплайна.

Остальные подпрограммы описаны в предыдущем разделе.

Описание входных данных для программы ВСМАТR начинается с карты I, предназначенной для идентификации вводимых данных. Формат карты 8A8.

Переменная	Назначение
TITLE	Заголовок задачи, 64 символа

Группа карт №2 содержит информацию об используемых в программе ВСМАТR файлах. Формат группы карт №2 - NAMELIST/FILES/:

&FILES IOUТ=, NT18=, NT19=, NT20=, NT21=, &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
IOUТ	- вывод информации на печать	6
NT18	- для хранения текущего значения R и рабочей информации. Сохраняется на время счета	I8
NT19	- временный рабочий файл	19
NT20	- в этом файле хранятся термы и волновые функции, записанные VSTERM	20
NT21	- в файл NT21 записываются вычисленные потенциалы V_{ij} и Q_{ij} в соответствии с оператором:	2I

```
WRITE(NT21)R,NROOT,(E(I),I=1,NROOT),
((Q(I,J),I=1,NROOT),J=1,NROOT),
((V(I,J),I=1,NROOT),J=1,NROOT)
```

Группа карт №3 содержит информацию, необходимую для организации процесса вычисления V_{ij} и Q_{ij} в заданных точках по R. Формат этой группы карт - NAMELIST /RMESH/:

&RMESH IREAD=, IRBEG=, IREND=, NGRID=, RGRID=, RVALUE=, NRECRD=, NRECHQ= &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
Переменные IREAD, IRBEG, IREND, NGRID, RGRID, RVALUE	имеют тот же смысл, что и в предыдущем разделе	
NRECRD	- число начальных записей в файле NT20 до начала вычисления термов	0
NRECHQ	- число начальных записей в файле NT21 до начала счета матричных элементов V_{ij} и Q_{ij}	0

Группа карт №4 содержит информацию о способе вычисления матричных элементов и печати результатов. Формат группы карт №4 - NAMELIST /TERMAT/:

&TERMAT NROOT=, IPRINT=, IPRTHQ=, IHQ=, NPART=, NP1=, ..., NP5= &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
NROOT	- размерность матрицы потенциалов (совпадает с числом вычисленных термов)	I
IPRINT	- имеет тот же смысл, что и в пункте 4.2	0

IPRTHQ - флаг печати матричных элементов	0
=0 - печать не производится	
=1 - печатаются термы E_i и матрицы V_{ij} и Q_{ij} в каждой точке по \mathcal{R}	
INHQ - задает способ вычисления производных базисных функций по \mathcal{R}	3
=1 - используются трехточечные конечно-разностные формулы	
=2 - используются пятиточечные конечно-разностные формулы	
=3 - используется кубическая сплайн-интерполяция по пяти точкам. Дифференцирование по \mathcal{R} осуществляется аналитически	

Группа карт №5 содержит информацию о рассматриваемой атомной системе. Она идентична группе карт №5 из пункта 4.2.

В результате работы программы ВСМАТН на файл NT21 будут записаны матричные элементы V_{ij} и Q_{ij} для заданного набора значений \mathcal{R} .

4.4. Программа ВСЕВНQ

Программа ВСЕВНQ предназначена для вычисления уровней энергии и радиальных волновых функций двухэлектронных атомов. Решение спектральной задачи (I4), (I8) разбито на четыре этапа: 1) ввод и обработка начальных данных; 2) генерация конечно-элементной сетки; 3) формирование глобальных матриц А и В и их профилей; 4) вычисление заданного количества собственных значений и собственных векторов задачи (26). Программа ВСЕВНQ состоит из 19 подпрограмм и содержит 2727 операторов. Ниже дано краткое описание основных подпрограмм.

- SPECTR - предназначена для ввода, обработки и печати начальных данных.
- ERRDIM - печать сообщений о недостающей памяти.
- NODGEN - вычисляет распределение узлов для каждого элемента.
- MAXHT - вычисляет адреса диагональных элементов матриц А и В.
- SHAPEF - вычисляет базисные функции $\zeta_{j,p}^k$ и их производные.
- QGAUSS - задает узлы и веса гауссовских квадратур.
- ASSMBL - выполняет суммирование локальных матриц жесткости и масс, формирует глобальные матрицы А и В.
- ELOAD - вычисляет для каждого элемента локальные матрицы масс
- ESTIF1 - вычисляет для каждого элемента локальные матрицы жесткости
- ESTIF2 - соответственно для диагональных и недиагональных элементов матриц потенциалов
- HQPOT - формирует матрицы потенциалов V_{ij} и Q_{ij} , осуществляет по желанию пользователя их сплайн-интерполяцию, подшивает асимптотики.

Описание входных данных для программы ВСЕВНQ начинается с карты №1, предназначенной для идентификации вводимых данных. Формат карты - 8A8.

Группа карт №2 предназначена для описания рассматриваемой системы. Формат этой группы карт - 2A4, 2A6.

Текстовые переменные	Назначение	Значение по умолчанию
ATOM	- обозначение атомной системы	H ⁺
TERM	- $2s+1L\pi$, где L - полный момент, S - полный спин, π - четность	1S ^e
CONFIG	- классификация состояния	1S ²

Группе карт №3 содержит информацию об используемых файлах. Формат группы карт №3 - NAMELIST/FILES/:

&FILES NT10=, NT11=, NT12=, NT20=, IOUF=, IOUT=, &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
NT10, NT11, NT12	- временные рабочие файлы	10, 11, 12
NT20	- в этом файле хранятся матрицы v и q	20
IOUF	- в файл IOUF записываются вычисленные значения энергии и радиальные функции	0
=0	- запись не производится	
>20	- выполняется бесформатная запись в соответствии с оператором	
WRITE(IOUF)ATOM,TERM,CONFIG,NDIM,MDIM,IDIM,NN,NNM,NWK,NGRID,NROOT,(E(I),I=1,NROOT),(XGRID(K),K=1,MGRID),((FUN(I,J),I=1,NN),J=1,NROOT)		
Здесь E и FUN соответственно значения энергии и радиальные функции, NGRID - число узлов сетки XGRID, NN=NDIM*(NGRID-2), NDIM - число радиальных уравнений, остальные параметры объясняются ниже		
IOUT	- вывод информации на печать	6

Группа карт №4 содержит информацию, необходимую для решения системы радиальных уравнений (I4). Формат группы карт №4 -

- NAMELIST /GRID/:

&GRID NDIM=, MDIM=, IDIM=, NROOT=, NMESH=, XMESH=, NPOL=, RPOL=, NITEM=, SHIFT=, NSPL=, IPRINT=, IPRTFN=, IPRSTP=, NRECRD= &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
NDIM	- размерность системы радиальных уравнений	I
NDIM	- размерность матриц потенциалов V_{ij} и Q_{ij} , записанных на файле NT20 (MDIM \geq NDIM)	I
IDIM	- задает номер потенциальной кривой V_{ii} . Используется при вычислении уровней энергии и радиальных функций в адиабатическом приближении (при сохранении члена H_{ii} в радиальном уравнении (I4) и IADT=C) или приближении Борна-Оппенгеймера (при пренебрежении членом H_{ii} и IADT=1) при значении NDIM=1. В противном случае IDIM игнорируется	I
NROOT	- число вычисляемых уровней энергии и радиальных функций (NROOT \leq 20)	I
NMESH	- размерность массива XMESSH (\leq 25). NMESH всегда нечетно	3
XMESSH	- массив данных для разбиения интервала изменения $R \in [R_{min}, R_{max}]$ на подинтервалы и всех элементов на группы элементов. Формируется следующим образом: XMESSH(1)= R_{min} , XMESSH(NMESH)= R_{max} , значения XMESSH(I) (I - четные и $2 \leq I < NMESH$) задают число элементов для подинтервала $[XMESSH(I-1), XMESSH(I+1)]$.	
NPOL	- степень интерполяционного многочлена Лагранжа (порядок конечного элемента). $1 \leq NPOL \leq 5$	3
RTOL	- относительная точность вычисления энергий	1.D-8
NITEM	- максимальное число итераций	30
SHIFT	- сдвиг спектра. Вычисляются NROOT собственных значений и векторов задачи (I4), (I8), ближайших к сдвигу	0.
NSPL	- число таблично заданных матриц потенциалов V_{ij} и Q_{ij} , записанных в NSPL точках на файле NT20. Если NSPL=0, то число значений таблицы совпадает с числом узлов NGRID сгенерированной конечноэлементной сетки. При этом из файла NT20 читается NGRID записей. Если NSPL $>$ 0 (NSPL $<$ NGRID), то из файла NT20 читается NSPL записей. Потенциалы V_{ij} и Q_{ij} интерпо-	0

	лируются с помощью кубической сплайн-интерполяции, после чего автоматически восстанавливаются значения V_{ij} и Q_{ij} в NGRID узлах конечноэлементной сетки.	
IPRINT	- флаг уровня печати: =0 - минимальный уровень печати. Печатаются входные данные, информация о конечноэлементной аппроксимации и результаты счета =1 - расширенная печать. Дополнительно распечатываются потенциалы V_{ij} и Q_{ij} в NGRID точках \geq 2 - максимальная печать. Используется при отладке	0
IPRTFN	- флаг печати радиальных функций =0 - печать не производится =1 - печатаются NROOT функций с шагом IPRSTP	0
IPRSTP	- шаг печати радиальных функций	10
NRECRD	- число начальных записей в файле NT20, после которых записаны табличные потенциалы	0

В группе карт №5 содержится дополнительная информация о рассматриваемой системе. Ее формат - NAMELIST /ATMSYS/:

```
&ATMSYS L=, ISPIN=, IPI=, LMAX=, ZA=, ZB=, ZC=,
AMMA=, AMMB=, AMMC=, EGRND=, IADT=, &END
```

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
Переменные L, ISPIN, IPI, LMAX, ZA, ZB, ZC, AMMA, AMMB, AMMC	имеют тот же смысл, что и выше.	
EGRND	- энергия основного состояния одноэлектронной системы в а.е.	0.
IADT	- флаг HSA-приближения (только при NDIM=1) =0 - адиабатическое приближение =1 - приближение Борна-Оппенгеймера	0

Группа карт №6 содержит информацию о дипольных асимптотиках потенциалов или термов (см., напр., [23]) и точках их сшивки с численными значениями потенциалов или термов. Формат этой группы карт - NAMELIST /ASYMP/:

```
&ASYMP IASYMP=, NPOR=, RAS=, CFDIP= &END
```

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
IASYMP	- флаг задания асимптотик =0 - асимптотики не подшиваются =1 - асимптотики подшиваются	0
NPOR	- массив размерности NDIM содержит номера порогов, к которым сходятся в порядке возрастания потенциальные кривые	
RAS	- массив размерности MDIM. В нем содержится информация о точках сшивки численных кривых с асимптотическими	
CFDIP	- массив размерности MDIM. Содержит дипольные коэффициенты при \mathfrak{R}^{-2}	

Недиагональные матричные элементы H_{ij} и Q_{ij} сшиваются в точке с номером NSPL с асимптотиками $H_{ij}^{(0)}/\mathfrak{R}^2$ и $Q_{ij}^{(0)}/\mathfrak{R}$, где коэффициенты $H_{ij}^{(0)}$ и $Q_{ij}^{(0)}$ определяются из условия сшивки.

В программе ВСЕВНQ предусмотрена возможность перехода к диабатическому представлению. Для этого в окрестности точек квазипересечения используется диабатическая интерполяция [15,17]. Формат группы карт №7 - NAMELIST/CROSSP/:

```
&CROSSP NCROSS=, NCROS1=, NCROS2=, RCROS1=, RCROS2= &END
```

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
NCROSS	- число точек квазипересечения (если =0, то диабатическая интерполяция не выполняется)	0
NCROS1	- номера попарно пересекаемых потенциальных кривых	
NCROS2		
RCROS1	- левая и правая границы области диабатической интерполяции для каждой пары кривых	
RCROS2		

5. ВЫЧИСЛЕНИЕ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ H^-

Работа пакета ВСАТОМ демонстрируется на примере расчета основного состояния H^- . Для всех трех этапов управляющие операторы ОС ЕС формируются единым образом. Считаем, что каждая из 3 программ пакета оттранслирована, отредактирована и записана под именем PROGMI в библиотеку загрузочных модулей PROGLIB. Одним из возможных вариантов пакета

управляющих операторов ОС ЕС может быть следующий:

```
//BCATOM JOB ...
//GEN EXEC PGM=IEBGENER
//SYSPRINT DD DUMMY
//SYSIN DD DUMMY
//SYSUT1 DD *

                начальные данные
//SYSUT2 DD DSN=&&PARM, UNIT=SYSDA, DISP=(,PASS),
//                DCB=(BLKSIZE=80,RECFM=F,LRECL=80),SPACE=(80,(40,10),ELSE)
//EV EXEC PGM=PROGMI,REGION=1500K
//STEPLIB DD DSN=PROGLIB,DISP=SHR
//FROSF001 DD DSN=*.GEN.SYSUT2,DISP=(OLD,PASS)

:
//
```

Ниже приведены примеры задания начальных данных и результаты счета для каждой из трех программ пакета. Начальные данные для расчета 1_s^e термов H^- в ВСТЕРМ задаются следующим образом:

```
1SE HYPERSPHERICAL TERMS FOR H-
&FILES IOU7=6, NT18=18, NT19=19, NT20=20, NT21=21 &END
&RMESH IREAD=0, IRBEG=1, IREND=206, RVALUE=0,
        NGRID=9, NRECRD=0,
        RGRID=0.2, 0.2,1.,0.1,15.,0.2,25.,0.25,30. &END
&FERMAT LMAX=8, NROOT=6, SHIFT=4., NITEM=30,
        IPRINT=0, IPRTFN=0, NPART=1, NP1=500, NP2=0 &END
&ATMSYS L=C, ISPIN=0, IPI=0, ZA=-1., ZB=-1., ZC=1.,
        AMMA=1., AMMB=1., AMMC=1836.1515 &END
```

Приведем значения термов $E_i(\mathfrak{R})$, $i=1,2,\dots,6$, вычисленные программой ВСТЕРМ в точке $\mathfrak{R}=5$: -1.069342, -0.225378, 0.018073, 0.827550, 1.449816, 2.018701.

Начальные данные для программы ВСМАТR задаются таким же образом, как для ВСТЕРМ, с тем только отличием, что в списке NAMELIST/FERMAT/ добавляются два параметра: INQ=3 и IPRTHQ=1. В результате работы программы ВСМАТR с ключом INQ=1 матрицы потенциалов $V_{ij}(\mathfrak{R})$ и $Q_{ij}(\mathfrak{R})$, $i, j=1,2,\dots,6$, в точке $\mathfrak{R}=5$ имеют вид:

$$V_{ij} = \begin{pmatrix} -1.044E+1 & .2938E-1 & -.3370E-1 & .2387E-3 & .19966E-2 & .1130E-1 \\ & -.1497E+0 & .1704E-1 & .5971E-2 & .1120E-1 & .1653E-1 \\ & & .8448E-1 & .7477E-2 & .9394E-2 & .2310E-1 \\ & & & .8235E+0 & .1931E-2 & .9164E-2 \\ & & & & .1448E+1 & .1998E-1 \\ & & & & & .2117E+1 \end{pmatrix},$$

$$Q_{ij} = \begin{pmatrix} .0 & .1447E+0 & .1068E+0 & .1181E-1 & .9027E-2 & .1512E-1 \\ .0 & .2469E+0 & .1456E-1 & .2760E-1 & .1964E-1 & \\ & .0 & -.2185E-1 & -.2515E-1 & .2169E-2 & \\ & & .0 & -.5443E-1 & -.3375E-1 & \\ & & & .0 & .1366E-1 & \\ & & & & .0 & \end{pmatrix}$$

Начальные данные для последнего этапа (ВСЕVHQ) задаются следующим образом:

```
GROUND STATE ENERGY FOR H- WITH ISOTOPIE EFFECTS
H- 1SE 1S2
&FILES IOUF=6, IOUF=0, NF10=10, NF11=11, NF20=20      &END
&GRID NDIM=6, MDIM=6, IDIM=1, NROOT=1, NRECRD=C,
      NMESH=3, XSMESH=0.08, 240., 24.08, NSPL=206,
      SHIFT=1.0556, IPRINT=0, IPRTFN=0, NPOL=4      &END
&ATMSYS L=0, ISPIN=0, IPI=0, LMAX=8, IADT=0      &END
&ASYMP IASYMP=0      &END
&CROSSP NCROSS=0      &END
```

Значение энергии основного состояния H^- , вычисленное в шестиканальном приближении HSA-подхода программой ВСЕVHQ, равно: $-0.527447^{10}0.00001$ а.е. Выполненный недавно вариационный расчет $E^{var} = -0.5274459$ а.е. [31] с использованием 225 пробных функций экспоненциального базиса [32] прекрасно согласуется с нашим результатом, полученным с учетом шести состояний HSA-базиса.

Отметим, что пакет ВСАТОМ позволяет рассчитывать спектры трехчастичных систем с кулоновским взаимодействием для произвольных зарядов и масс ($m_a = m_b \ll m_c$). Интересно рассмотреть также случай, когда все массы и заряды различны, т.е. частицы нетождественны. Для этого необходимо заменить граничные условия (I2) условиями $\Psi_{\text{Галл}}^{(c)}(0; \mathcal{R}) = \Psi_{\text{Галл}}^{(c)}(\pi/2; \mathcal{R}) = 0$. Эти условия могут быть легко реализованы в пакете ВСАТОМ. Кроме того, пакет ВСАТОМ можно использовать для расчета спектров трехатомных молекул типа H_2O , CO_2 и других. Большой интерес представляет также использование HSA-представления для решения задачи рассеяния в системе трех заряженных частиц с учетом перераспределения и развала с использованием схем метода конечных элементов [33].

ЛИТЕРАТУРА

1. K.Smith, Repts.Progr.Phys. 29(1966)373
2. P.G.Burke, Adv.Atom.Mol.Phys. 4(1968)173
3. G.J.Schulz, Rev.Mod.Phys. 45(1973)378
4. P.G.Burke, W.D.Robb, Adv.Atom.Mol.Phys. 11(1975)143

5. J.Callaway, Phys. Repts. 45(1978)89
6. D.E.Golden, Adv.Atom.Mol.Phys. 14(1978)1
7. J.Callaway, Adv.Phys. 29(1980)771
8. J.Callaway, Comm.Atom.Mol.Phys. 10(1981)279
9. D.R.Herrick, Adv.Chem.Phys. 52(1983)1
10. Y.K.Ho, Phys. Repts. 99(1983)1
11. U.Fano, Rep. Progr. Phys. 46(1983)97
12. U.Fano, A.R.P.Rau, Atomic Collisions and Spectra (Wiley, New York, 1985)
13. C.D.Lin, Adv. Atom. Mol. Phys. 22(1986)77
14. С.И.Никитин, В.Н.Островский, в кн.: Проблемы теоретической физики. III (Изд-во ЛГУ, Ленинград, 1988), с. 64-89.
15. J.H.Macek, J.Phys. B 1(1968)831
16. C.H.Greene, Phys. Rev. A 23(1981)661
17. B.L.Christensen-Dalgaard, Phys.Rev. A 29(1984)470; 2242.
18. D.M.Hood and A.Kuppermann, In Theory of Chemical Reaction Dynamics, ed. by D.C.Clary (D.Reidel Publ. Co., Boston, 1986), p. 193-214.
19. А.Г.Абрашкевич, М.И.Гагсак, В.И.Ленд'ел, В.Ю.Пойда, И.В.Пузынин, Phys.Lett.A 133(1988)140.
20. А.Г.Абрашкевич, С.И.Виницкий, М.С.Касчиев, И.В.Пузынин. ЯФ 48(1988)945.
21. А.Г.Абрашкевич, Д.Г.Абрашкевич, С.И.Виницкий, М.С.Касчиев, В.Ю.Пойда, И.В.Пузынин. Препринт ОИЯИ Р4-88-640, Дубна, 1988.
22. А.Г.Абрашкевич, Д.Г.Абрашкевич, С.И.Виницкий, И.В.Пузынин, И.В.Химич. Препринт ОИЯИ Р4-88-746, Дубна, 1988.
23. А.Г.Абрашкевич, Д.Г.Абрашкевич, С.И.Виницкий, И.В.Пузынин. Препринт ОИЯИ Р4-89-311, Дубна, 1989.
24. R.Radau, Ann.Sci.Ecole Normale Superior 5(1868)311.
25. F.T.Smith, Phys.Rev.Lett. 45(1980)1157.
26. А.Г.Абрашкевич, С.И.Виницкий, Ю.Л.Грига, М.С.Касчиев, И.В.Пузынин. Препринт ОИЯИ Р11-88-745, Дубна, 1988.
27. А.Г.Абрашкевич, М.С.Касчиев, И.В.Пузынин. Препринт ОИЯИ Р11-88-744, Дубна, 1988.
28. K.J.Bathe, Finite element procedures in engineering analysis (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1982).
29. М.Касчиев, В.Касчиева. Препринт ОИЯИ Р5-12787, Дубна, 1979.
30. Г.Стрэнг, Дж. Фикс. Теория метода конечных элементов (Мир, Москва, 1977).
31. А.М.Фролов, Z.Phys. D 2(1986)61.
32. A.J.Thakkar and V.H.Smith, Jr., Phys. Rev. A 15(1977)1; 16.
33. R.T.Pack and G.A.Parker, J.Chem.Phys. 87(1987)3888.

Рукопись поступила в издательский отдел
13 июня 1989 года.

Абрашкевич А.Г. и др.

P11-89-427

BCATOM — пакет программ для вычисления уровней энергии и волновых функций гелиеподобных систем с учетом изотопических эффектов

Дано описание пакета программ BCATOM, предназначенного для вычисления в гиперсферическом адиабатическом подходе уровней энергии и волновых функций гелиеподобных систем с учетом изотопических эффектов. Для аппроксимации соответствующих задач Штурма-Лиувилля применяются метод конечных разностей и метод конечных элементов. Для решения полученных обобщенных алгебраических задач на собственные значения используется метод итерации подпространств. Возможности пакета демонстрируются расчетом характеристик основного состояния отрицательного иона водорода.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1989

Перевод Г.Г.Сандуковской

Abrashkevich A.G. et al.

P11-89-427

BCATOM — Package of Programs for Calculating the Energy Levels and Wave Functions of Helium-Like Systems Taking into Account Isotopic Effects

Description of package BCATOM for calculating the energy levels and wave functions of helium-like systems in the hyperspherical adiabatic approach taking into account the isotopic effects is given. The corresponding Sturm-Liouville problems are approximated by the difference method and the high order accuracy finite element method. The obtained generalized algebraic eigenvalue problems are solved by subspace iteration method. Possibilities of the package are demonstrated by calculating the ground state characteristics of a negative hydrogen ion.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1989