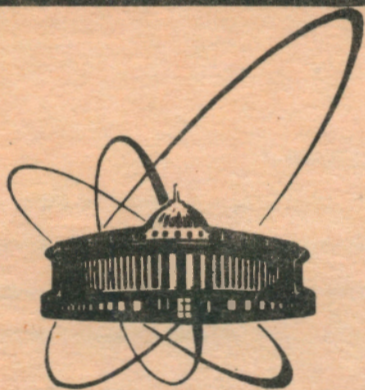


91-138



**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P11-91-138

Т. Жанлав, Д. В. Павлов, И. В. Пузынин

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ДВУХ ЦЕНТРОВ

1991

1. Введение

Задача двух центров в квантовой механике (задача $Z_1 e Z_2$) состоит в нахождении волновых функций электрона, движущегося в поле двух закрепленных зарядов Z_1 и Z_2 , удаленных друг от друга на расстояние R . При этом стационарное уравнение Шредингера имеет вид^{/1/}

$$\left[-\frac{1}{2} \Delta_{\vec{r}} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2} \right] \psi(R, \vec{r}) = E \psi(R, \vec{r}), \quad (1.1)$$

где \vec{r} - вектор, соединяющий середину отрезка R с электроном, r_1 и r_2 - расстояния от электрона до зарядов Z_1 и Z_2 соответственно, а E - энергия связи электрона.

Как известно, уравнение (1.1) допускает разделение переменных в вытянутых сфероидальных координатах

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R}, \quad 1 \leq \xi < +\infty; \quad \eta = \frac{r_1 - r_2}{R}, \quad -1 \leq \eta \leq 1.$$

Подстановка в уравнение (1.1) представления волновой функции ψ в виде

$$\psi = F(\xi) \Phi(\eta) e^{\pm im\varphi}, \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi$$

приводит^{/1/} к следующим уравнениям для $F(\xi)$ и $\Phi(\eta)$

$$\frac{d}{d\xi} \left[\xi^2 - 1 \right] \frac{dF}{d\xi} + \left[\frac{ER^2}{2} (\xi^2 - 1) - \lambda + a\xi - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] F = 0, \quad (1.2)$$

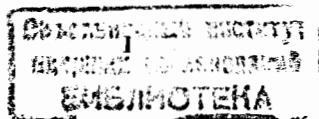
$$\frac{d}{d\eta} \left[1 - \eta^2 \right] \frac{d\Phi}{d\eta} + \left[\frac{ER^2}{2} (1 - \eta^2) + \lambda + b\eta - \frac{m^2}{\eta^2 - 1} \right] \Phi = 0, \quad (1.3)$$

где $a = R(Z_1 + Z_2)$, $b = R(Z_1 - Z_2)$, λ - константа разделения.

Предполагается, что

$$|F(1)| < \infty, \quad |\Phi(\pm 1)| < \infty. \quad (1.4)$$

Функция $F(\xi)$ имеет различные асимптотики при $\xi \rightarrow +\infty$ в случаях дискретного ($E < 0$) и непрерывного ($E > 0$) спектров. Если $E < 0$, то



энергия принимает дискретный ряд значений и

$$F(\xi) \sim \frac{e^{-p\xi}}{1 - a/2p} \text{ при } \xi \rightarrow +\infty, \quad -p^2 = \frac{ER^2}{2}. \quad (1.5)$$

Для $E > 0$ (непрерывный спектр) функция $F(\xi)$ при $\xi \rightarrow +\infty$ имеет следующую асимптотику

$$F(\xi) \sim \frac{1}{c\xi} \sin \left(c\xi + \frac{a}{2c} + \ln 2c\xi - \frac{\pi}{2} (1 + \Delta) \right) + o \left(\frac{1}{\xi^2} \right), \quad (1.6)$$

где $c = R \sqrt{\frac{E}{2}}$, l - орбитальный момент, Δ - фаза рассеяния.

Задача двух центров играет фундаментальную роль в теории атомных столкновений. Как известно, решение задачи $Z_1 e Z_2$ служит базисом, по которому разлагаются решения более сложных задач, например, волновые функции задачи трех тел с кулоновским взаимодействием.

Традиционно задача двух центров решалась с помощью разложения искомых функций F, Φ по полиномам, зависящих от независимых переменных^{/1-6/}. Коэффициенты этих разложений зависят от параметров задачи и удовлетворяют некоторым рекуррентным соотношениям, из которых определяются коэффициенты разложения и искомые константы ν и λ . При этом точность результатов обеспечивалась экспериментальным подбором числа членов разложений и других параметров вычислительной схемы. Задача $Z_1 e Z_2$ решалась также с помощью метода конечных разностей^{/7/}, точность которого для задачи Штурма - Лиувилля оценивается теоретически^{/8/} и может быть повышена экстраполяцией по шагу сетки^{/9/}.

В последнее время к задаче двух кулоновских центров вновь возник интерес в связи с ее исследованиями на комплексной плоскости^{/10/}. Они требуют разработки более универсальных алгоритмов и программ для решения задачи $Z_1 e Z_2$, пригодных одновременно в дискретном и непрерывном спектрах. Перед новыми алгоритмами ставятся требования повышения точности на основе

детерминированных оценок и скорости вычислений за счет оптимизации вычислительных схем.

В настоящей работе предложены два алгоритма решения задачи (1.2-6), которые могут служить основой для ее решения в комплексной плоскости. Первый алгоритм использует метод сплайна - аппроксимации и непрерывный аналог метода Ньютона с включением возмущения^{/11/}. Во втором алгоритме применен конечно - разностный метод и непрерывный аналог метода Ньютона^{/12/}.

В пунктах 2,3 приводятся постановки задачи $Z_1 e Z_2$ в дискретном и непрерывном спектрах, позволяющие единообразно сформулировать эти задачи как нелинейные функциональные уравнения. Далее (пункт 4) рассматриваются численные алгоритмы. В пункте 5 обсуждаются результаты расчетов.

2. Дискретный спектр

Известно, что для краевой задачи (1.2-5) при каждом фиксированном значении параметров R и m существует дискретный набор собственных значений (E, λ) , а соответствующие собственные функции определяются с точностью до постоянных множителей. Условия ограниченности волновых функций (1.4) являются неопределенными. Неопределенность можно обойти при помощи некоторых преобразований. Ниже мы рассмотрим два типа граничных условий.

2.1. Сделаем в (1.2-3) преобразование

$$f(\xi) = (\xi^2 - 1)^{\frac{m}{2}} F(\xi), \quad \phi(\eta) = (1 - \eta^2)^{\frac{m}{2}} \Phi(\eta), \quad (2.1)$$

в результате которого мы имеем

$$L_1 \phi \equiv \phi'' - \frac{2(m+1)\eta}{1 - \eta^2} \phi' + \left[\frac{ER^2}{2} + \frac{b\eta + \lambda}{1 - \eta^2} - \frac{m(m+1)}{1 - \eta^2} \right] \phi = 0, \quad (2.2)$$

$$L_2 f \equiv f'' + \frac{2(m+1)\xi}{\xi^2 - 1} f' + \left[\frac{ER^2}{2} + \frac{a\xi - \lambda}{\xi^2 - 1} + \frac{m(m+1)}{\xi^2 - 1} \right] f = 0. \quad (2.3)$$

Из (2.2-3) ясно, что для того, чтобы уравнения имели смысл при $\eta \rightarrow \pm 1$ и $\xi \rightarrow 1$, необходимо выполнение равенств

$$-2\eta(m+1) \Phi'(\eta) + (b\eta + \lambda - m(m+1)) \Phi(\eta) = 0, \quad \eta \rightarrow \pm 1,$$

$$2\xi(m+1) f'(\xi) + (a\xi - \lambda + m(m+1)) f(\xi) = 0, \quad \xi \rightarrow 1.$$

Отсюда, учитывая асимптотику^{/1/} для $f(\xi)$ получаем граничные условия:

$$l_1 \Phi \equiv \Phi' + \frac{\lambda - b - m(m+1)}{2(m+1)} \Phi = 0, \quad \eta = -1, \quad (2.4)$$

$$l_2 \Phi \equiv \Phi' - \frac{\lambda + b - m(m+1)}{2(m+1)} \Phi = 0, \quad \eta = 1,$$

$$\bar{l}_1 f \equiv f' - \frac{a - \lambda + m(m+1)}{2(m+1)} f = 0, \quad \xi = 1, \quad (2.5)$$

$$\bar{l}_2 f \equiv \left[p + \frac{m+1-\bar{a}}{\xi} + \frac{\lambda - \bar{a} - \bar{a}^2}{2p\xi^2} \right] f + f' = 0, \quad \bar{a} = \frac{a}{2p}, \quad \xi \rightarrow \infty.$$

Однородные краевые условия (2.4-5) позволяют ввести нормировку радиальной и угловой волновых функций, например, в виде

$$\int_1^{\infty} f^2(\xi) d\xi - 1 = 0, \quad \int_{-1}^1 \Phi^2(\eta) d\eta - 1 = 0. \quad (2.6)$$

2.2. Воспользуемся постановкой задачи, данной в работе^{/7/}. Перейдем в уравнениях (1.1-2) от функций F и Φ к новым неизвестным функциям x и y при помощи преобразования Яффе^{/1/}

$$x = (\xi^2 - 1) F, \quad y = (1 - \eta^2) \Phi.$$

Затем, используя дробно-рациональное преобразование независимой переменной ξ

$$\mu = \frac{\xi - 1}{\xi + 1},$$

перейдем от интервала $1 \leq \xi < +\infty$ к промежутку $0 \leq \mu \leq 1$.

Преобразованные уравнения (1.1-2) будут иметь вид

$$\left[\mu(1-\mu)^2 \frac{d^2}{d\mu^2} - (1+2\mu-3\mu^2) \frac{d}{d\mu} + \right.$$

$$\left. + ER^2 \frac{1+\mu^2}{(1-\mu)^2} + \lambda + \frac{a(1+\mu)}{1-\mu} - \frac{m^2(1-\mu)^2}{4\mu} + \frac{1+\mu^2}{\mu} \right] x(\mu) = 0, \quad (2.7)$$

$$\left[(1-\eta^2) \frac{d^2}{d\eta^2} + 2\eta \frac{d}{d\eta} - ER^2 - \frac{1+\eta^2}{2} - \lambda - b\eta - \frac{m^2}{1-\eta^2} + \frac{2(1+\eta^2)}{1-\eta^2} \right] y(\eta) = 0. \quad (2.8)$$

Граничные условия для функций $x(\mu), y(\eta)$ после проведенных преобразований выглядят следующим образом:

$$x(0) = x(1) = 0, \quad y(-1) = y(1) = 0. \quad (2.9)$$

Для замыкания системы дифференциальных уравнений (2.7-8) с граничными условиями (2.9) будем считать, что функции $x(\mu), y(\eta)$ удовлетворяют условиям нормировки.

$$\int_0^1 x^2(\mu) d\mu - 1 = 0, \quad \int_{-1}^1 y^2(\eta) d\eta - 1 = 0. \quad (2.10)$$

Таким образом, мы получили в обоих случаях нелинейное уравнение относительно неизвестных собственных значений и собственных функций.

3. Непрерывный спектр

Известно, что в случае непрерывного спектра задается величина $E = \frac{k^2}{2} > 0$, а искомая фаза рассеяния находится из асимптотики для радиальной волновой функции $F(\xi)$ при $\xi \rightarrow \infty$. Другим возможным подходом является постановка задачи рассеяния как задачи на собственные значения. Ниже рассмотрены эти два подхода.

3.1. Решение уравнения Шредингера (1.1) допускает разделение переменных при представлении волновой функции ψ в виде

$$\psi = \frac{(\xi^2 - 1)^{\frac{m}{2}}}{\xi^{m+1}} (1 - \eta^2)^{\frac{m}{2}} F(\xi) \Phi(\eta) e^{\pm im\varphi}, \quad (3.1)$$

в котором $\Phi(\eta)$ есть решение задачи (2.2), (2.4), а $F(\xi)$

удовлетворяет уравнению

$$\hat{L}_2 F \equiv F'' + \frac{2(m+1)}{\xi(\xi^2-1)} F' + \left\{ c^2 + \frac{a\xi-\lambda}{\xi^2-1} - \frac{(m+1)(m+2)}{\xi^2(\xi^2-1)} \right\} F = 0, \quad (3.2a)$$

$$c = \frac{1}{2} Rk, \quad 1 \leq \xi < \infty$$

и граничным условиям

$$\hat{L}_1 F \equiv F' + \frac{a-\lambda-(m+1)(m+2)}{2(m+1)} F = 0, \quad \xi = 1, \quad (3.2b)$$

$$F(\xi) \sim \sin\left(c\xi + \frac{a}{2c} \ln 2c\xi - \frac{\pi}{2} 1 + \Delta\right), \quad \xi \rightarrow \infty. \quad (3.2c)$$

В излагаемом подходе параметр λ в радиальном уравнении (3.2a) перестает быть произвольным и должен выбираться как собственное значение задачи (2.2), (2.4).

При $c\xi \gg 1$ асимптотику радиальной функции $F(\xi)$ можно представить в виде

$$F(\xi) = f_0(\xi) \sin\theta(\xi) + g_0(\xi) \cos\theta(\xi), \quad (3.3)$$

$$\text{где } f_0(\xi) = \sum_{i=0}^{n_1} \frac{a_i}{(c\xi)^i}, \quad g_0(\xi) = \sum_{i=0}^{n_1} \frac{b_i}{(c\xi)^i}, \quad (3.4)$$

$$\theta(\xi) = c\xi + \frac{a}{2c} \ln 2c\xi - \frac{\pi}{2} 1 + \Delta, \quad n_1 > 0 - \text{целое число.}$$

Подставляя выражение (3.3) в уравнение (3.2a), легко найти формулы для коэффициентов a_i, b_i , которые однозначно определяются, если заданы a_0, b_0 .

Из (3.3) найдем

$$F'(\xi) = f_1(\xi) \sin\theta(\xi) + g_1(\xi) \cos\theta(\xi) + O\left\{(c\xi)^{-(n_1+1)}\right\}, \quad (3.5)$$

$$\text{где } f_1(\xi) = \sum_{i=0}^{n_1} \frac{d_i}{(c\xi)^i}; \quad g_1(\xi) = \sum_{i=0}^{n_1} \frac{\mu_i}{(c\xi)^i};$$

$$d_0 = -cb_0, \quad d_1 = -c \left[(i-1)a_{i-1} + b_i + \frac{a}{2c} b_{i-1} \right], \quad i=1, 2, \dots,$$

$$\mu_0 = ca_0, \quad \mu_1 = c \left[-(i-1)b_{i-1} + a_i + \frac{a}{2c} a_{i-1} \right], \quad i=1, 2, \dots$$

Если пренебречь членом $O\left\{(c\xi)^{-(n_1+1)}\right\}$ в (3.3), (3.5), то из них легко получаем уравнение

$$\hat{L}_2 F \equiv (Ff_1' - f_0'F')^2 + (Fg_1' - g_0'F')^2 - (g_0'f_1' - g_1'f_0')^2 = 0, \quad c\xi \rightarrow \infty, \quad (3.6)$$

которое можно рассматривать как приближенное граничное условие для F в достаточно удаленной точке $\xi_M = c\xi \gg 1$.

Таким образом, мы имеем краевую задачу

$$\begin{aligned} L_2 \hat{F} &= 0, \quad 1 < \xi \leq \xi_M, \\ \hat{L}_1 \hat{F} &= 0, \quad \xi = 1, \\ \hat{L}_2 \hat{F} &= 0, \quad \xi = \xi_M. \end{aligned} \quad (3.7)$$

После решения задачи (3.7) фаза рассеяния находится по формуле

$$\Delta = -c\xi - \frac{a}{2c} \ln 2c\xi + \frac{\pi}{2} 1 + \arctg \frac{Fg_1' - g_0'F'}{F'f_0' - Ff_1'}, \quad \xi = \xi_M, \quad (3.8)$$

при условии $f_0'g_1' - g_0'f_1' \neq 0$, $\xi = \xi_M$, которое выполняется для больших ξ_M , в частности если взять $a_0 = 1/\sqrt{c}$, $b_0 = 0$.

Заметим, что методика построения нелинейного условия (3.16) с успехом может быть применена для задачи рассеяния, если известна асимптотика потенциала. Условие $u'^2 + k^2 u^2 - k^2 = 0$, рассмотренное в^{/13/}, является частным случаем условия (3.6) при $n_1 = 1$ с коэффициентами $a_0 = 1, a_1 = 0, b_0 = 0, b_1 = 1(1+1)/(2k)$ (см. также^{/14/}).

3.2. Другой подход к постановке задачи в непрерывном спектре заключается в ее формулировке как задачи на собственные значения^{/15/}. Осуществим переход от функций $F(\xi), \Phi(\eta)$ к новым неизвестным функциям $x(\xi), y(\eta)$ при помощи преобразования

$$x = (\xi - 1) F, \quad y = (1 - \eta^2) \Phi.$$

Преобразованные уравнения (1.1-2) имеют вид

$$\left[(\xi^2 - 1) \frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi \frac{d}{d\xi} + ER^2 \frac{1 + \xi^2}{2} + \lambda + a\xi - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} + \frac{2}{\xi - 1} \right] x(\xi) = 0, \quad (3.9)$$

$$\left[(1 - \eta^2) \frac{d^2}{d\eta^2} + 2\eta \frac{d}{d\eta} - ER^2 \frac{1 + \eta^2}{2} - \lambda - b\eta - \frac{m^2}{1 - \eta^2} + \frac{2(1 + \eta^2)}{1 - \eta^2} \right] y(\eta) = 0. \quad (3.10)$$

Граничные условия для функций $x(\xi), y(\eta)$ после проведенного преобразования получаются следующие

$$x(0) = 0, \quad y(-1) = y(1) = 0. \quad (3.11)$$

Функция $x(\xi)$ при $\xi \rightarrow +\infty$ имеет асимптотику

$$x(\xi) \sim \left[1 - \frac{1}{\xi} \right] \sin \left[c\xi + \frac{a}{2c} \ln 2c\xi - \frac{\pi}{2} (1 + \Delta) \right]. \quad (3.12)$$

При численном решении уравнения (3.9) фиксируется значение переменной ξ , начиная с которого асимптотика (3.12) выполняется достаточно точно. Пусть ξ_M - это значение. Тогда, согласно выписанной асимптотике функции $x(\xi)$, мы можем предположить, что при некотором значении энергии E (то есть коэффициента c) функция $x(\xi)$ обратится в ноль при $\xi = \xi_M$. Следовательно, можно поставить нулевое граничное условие в точке $\xi = \xi_M$ для функции $x(\xi)$

$$x(\xi_M) = 0. \quad (3.13)$$

Если затем мы найдем соответствующее значение энергии E , то, используя асимптотическое разложение (3.12) и граничное условие (3.13), можно приближенно найти фазу Δ из выражения

$$\left[1 - \frac{1}{\xi_M} \right] \sin \left[c\xi_M + \frac{a}{2c} \ln 2c\xi_M - \frac{\pi}{2} (1 + \Delta) \right] = 0,$$

Она будет иметь вид

$$\Delta = \pi j - \left[c\xi_M + \frac{a}{2c} \ln 2c\xi_M - \frac{\pi}{2} (1 + \Delta) \right]. \quad (3.14)$$

Здесь j - целое число, выбирающееся так, чтобы $0 \leq \Delta < \pi$.

Сформулированная задача на собственные значения, дополненное условием нормировки собственных функций, представляет собой нелинейное функциональное уравнение^{/16/}.

4. Вычислительные схемы

Изложенные в предыдущих пунктах два подхода к постановке задач дискретного и непрерывного спектров дают возможность в каждом случае сформулировать поставленную задачу как нелинейное функциональное уравнение. Для дискретного спектра существенных различий в рассмотренных постановках задач нет: сформулированные задачи на собственные значения рассматриваются лишь в разных областях изменения независимых переменных. В непрерывном спектре постановки существенно отличаются, поскольку в первом подходе формулируется нелинейная граничная задача, а во втором - задача на собственные значения. Однако в итоге мы приходим к единообразной постановке рассматриваемых задач в виде нелинейного уравнения, компонентами которого являются полученные системы уравнений, граничные условия и дополнительные условия нормировки искомых функций в случае однородных граничных условий.

Мы применяем различные методы дискретной аппроксимации рассматриваемых задач: метод сплайн - коллокации и метод конечных разностей, которые учитывают особенности используемых подходов и позволяют взаимно контролировать точность вычислений.

4.1. При дискретизации задач (2.2-6) и (3.7) применена схема сплайн - аппроксимации^{/17,18/} четвертого порядка точности относительно шага равномерной сетки.

Для решения полученных нелинейных систем применен непрерывный аналог метода Ньютона с функцией включения^{/14/}, который позволил получить решение, обращая на каждой итерации трехточечный оператор.

В зависимости от номера квантового состояния (N_{lm}) в качестве начального приближения волновых функций Φ и F можно взять, например, функции, имеющие $q = l-m$ и k нулей (синусоиду в случае непрерывного спектра) на интервалах $(-1,1)$ и $(1, \xi_M)$. Здесь главное квантовое число определяется по формуле

$$N = k+q+m+1.$$

Что касается собственных значений ϵ и λ , то можно использовать их асимптотики^{/1,19,20/}.

Удачный выбор итерационного параметра τ_n ^{/12/} способствует ускорению сходимости итераций.

4.2. Во втором подходе задачи для расчета характеристик системы двух центров в случаях дискретного и непрерывного спектров имеют единообразную форму

$$\left\{ \begin{array}{l} P x(t) + ER^2 f(t) x(t) + \lambda x(t) = 0 \\ x(a) = x(b) = 0 \\ Q y(\eta) - ER^2 g(\eta) y(\eta) - \lambda y(\eta) = 0 \\ y(0) = y(1) = 0 \\ \int_a^b x^2(t) dt - 1 = 0 \\ \int_{-1}^1 y^2(\eta) d\eta - 1 = 0, \end{array} \right.$$

где P и Q - дифференциальные операторы второго порядка; f и g - известные функции независимых переменных; $a=0$, $b=1$ в случае дискретного спектра; $a=1$, $b=\xi_M$ для задачи рассеяния.

Получившееся функциональное уравнение, в котором неизвестными являются функции x, y и скалярные величины ϵ, λ , решается при помощи непрерывного аналога метода Ньютона^{/21/}. Дискретизация по непрерывному параметру проведена по методу Эйлера с переменным шагом, выбор которого осуществляется согласно работе^{/22/}.

Аппроксимация по пространственным переменным выполнена на равномерной сетке с использованием конечно - разностных формул четвертого порядка аппроксимации по шагу сетки.

Матрицы линейных систем, получающихся в ходе решения, приводятся к пятидиагональным. Обращение таких матриц осуществляется при помощи LU-разложения.

Начальное приближение для функций x, y задается в виде синусоиды с нужным числом нулей.

Выбор максимального значения переменной ξ в случае непрерывного спектра имеет принципиальное значение. В предложенном алгоритме выбор ξ_M осуществляется из условия минимальности величины

$$D = \int_{\xi_M^{-d}}^{\xi_M} \left[x(\xi) - \left(1 - \frac{1}{\xi}\right) \sin(c\xi + \frac{a}{2c} \ln 2c\xi - \frac{\pi}{2} 1 + \Delta) \right]^2 d\xi,$$

где d достаточно велико ($d = 1/15 \xi_M$).

5. Численные результаты

Для подтверждения работоспособности и точности разработанных нами методов приведем результаты расчетов как для дискретного, так и для непрерывного спектров.

5.1. В случае дискретного спектра расчеты сделаны для различных состояний при $Z_1 = Z_2 = 1$; результаты приведены в таблице №1, где также приведены результаты, полученные в работе^{/6/} методом разложения решений в ряд по полиномам Лежандра.

При постановке граничных условий согласно пункту 2.1 использовалась асимптотика (1.5), и поэтому выбор ξ_M естественно зависит от значений ϵ и R . Требуется взять ξ_M большим, когда $\epsilon \ll 1$ и $R \ll 1$. В то же время для задачи (2.8-9) граничные условия поставлены точно, то есть этот подход имеет преимущество в случае $\epsilon \ll 1$ и $R \ll 1$.

Сравнение результатов работы^{/6/} с нашими расчетами показывает,

что при выбранных параметрах сетки метод сплайн-аппроксимации и метод конечных разностей дают результаты с достаточно высокой точностью, которая при необходимости может быть повышена путем построения сеток с оптимальными параметрами или экстраполяцией по этим параметрам.

5.2. В случае непрерывного спектра параметры задачи (1.2-3) были выбраны $R = 2$, $Z_1 = Z_2 = 1$.

Для алгоритма, предложенного в пункте 3.1 в зависимости от значения $c = \frac{kR}{2}$ число членов в рядах (3.4-5) выбрано в пределах от 10 до 20.

Если решать задачу рассеяния способом, предложенным в пункте 3.2, то непосредственно получить фазу рассеяния, соответствующую наперед заданному значению энергии, нельзя. Для решения этой задачи мы получаем несколько значений фаз рассеяния при энергиях, значения которых близки к заданному, а потом делаем интерполяцию для заданного значения энергии.

Результаты расчетов при различных значениях k и l, m приведены в таблице №2. Полученные значения фазы рассеяния находятся в хорошем согласии с результатами работ^{/23-26/}.

Расчеты выполнены на ЭВМ РС/АТ. Программа занимает ~0.5 Мб оперативной памяти; время расчета одного варианта ~60 с.

Заключение

В работе даны различные постановки граничных задач для задачи двух центров в случаях дискретного и непрерывного спектров. Сформулированные задачи рассматриваются как нелинейное функциональное уравнение, для решения которого применяются непрерывный аналог метода Ньютона и его модификация. Дискретизация задачи осуществляется с помощью методов сплайн-аппроксимации и конечных разностей точности $O(h^4)$, где h - шаг сетки.

таблица №1. Энергия связи электрона (дискретный спектр)

R	1sσ	2sσ	3pσ	
0.5	-1.734988000	-0.465074000	-0.227101924	A
	-1.734987185	-0.465073929	-0.227104325	B
	-1.734988000	-0.465074000	-0.227101924	C
1	-1.451786313	-0.422924589	-0.239315480	A
	-1.451786312	-0.422924588	-0.239315476	B
	-1.451786313	-	-	C
2	-1.102634215	-0.360864875	-0.255413165	A
	-1.102634222	-0.360864875	-0.225413155	B
	-1.102634214	-	-	C
3	-0.910896197	-0.318887054	-0.253178033	A
	-0.910896227	-0.318887054	-0.253178013	B
	-0.910896197	-	-	C
4	-0.796084884	-0.288514867	-0.245109550	A
	-0.796084960	-0.288514870	-0.245109540	B
	-0.796084884	-	-	C
5	-0.724420295	-0.265505815	-0.236073136	A
	-0.724420466	-0.265505823	-0.236073175	B
	-0.724420295	-	-	C

- A - результаты работ^{/6/};
 B - результаты настоящей работы по методу сплайн-аппроксимации;
 $h_{\xi} = 0.0125$, $h_{\eta} = 0.0125$, $1s\sigma: \xi_M = 11$, $2s\sigma, 3p\sigma: \xi_M = 41$.
 C - результаты настоящей работы по методу конечных разностей.
 $h_{\mu} = 0.001$, $h_{\eta} = 0.001$.

таблица №2. Фаза рассеяния Δ для различных k и m, l .
 Фазы рассеяния из работ^{/23-26/} нормированы в интервал $0 \leq \Delta < \pi$.

- A - результаты работ^{/23/};
 B - результаты работ^{/24/};
 C - результаты работ^{/25/};
 D - результаты работ^{/26/};
 E - результаты настоящей работы по методу сплайн-аппроксимации;
 $h_{\xi} = 0.0125$, $h_{\eta} = 0.0125$, $k = 0.1: \xi_M = 401$, $k = 0.9, 1, 4: \xi_M = 11$.
 F - результаты настоящей работы по методу конечных разностей.
 $h_{\xi} = 0.005$, $h_{\eta} = 0.005$, $\xi_M = 301$.

m, l	k = 0.1	k = 0.9	k = 1	k = 4	
0,0	2.168425	1.732117	1.904003	2.465617	A
	2.170227290	1.728637204	1.900248954	2.472350634	B
	2.1702293	1.7286380	1.9002487	2.4723516	C
	-	1.7287048	1.9003010	2.4723625	D
	2.1702197	1.7286374	1.9002490	2.4723481	E
	2.1702669	1.7286999	1.9002409	2.4723577	F
0,1	2.274631	2.079278	2.266438	2.649086	A
	2.276344790	2.075838524	2.262783434	2.655814824	B
	2.2763467	2.0758383	2.2627837	2.6558152	C
	-	2.0758356	2.2627871	2.6558619	D
	2.2763700	2.0758387	0.8788093	2.6558144	E
	-	-	-	2.6558117	F
0,2	0.581513	1.184631	1.456583	2.858779	A
	0.583197930	1.181202910	1.452865130	2.865500630	B
	0.5831981	1.1812032	1.4528656	2.8655002	C
	-	1.1812032	1.4528831	2.8655041	D
	0.5832127	1.1812024	1.4528645	2.8655006	E
	-	-	-	2.8654907	F
0,3	2.095600	0.323288	0.641097	2.810858	A
	2.097219470	0.319907010	0.637429100	2.817576274	B
	2.0972193	0.3199071	0.6374292	2.8175739	C
	-	0.3199202	0.6374399	2.8175849	D
	2.0972339	0.3199061	0.6374280	2.8175753	E
	-	-	-	2.8175647	F
1,1	1.288417	1.228323	1.439636	2.437395	A
	1.290107540	1.224877070	1.435894230	2.444128334	B
	1.2901066	1.2248771	1.4358948	2.4441278	C
	-	1.2249423	1.4359606	2.4441386	D
	1.2901206	1.2248768	1.4358940	2.4441386	E
	-	-	-	2.4441357	F
1,2	0.367302	0.914822	1.174919	2.530930	A
	0.368967470	0.911398680	1.171195170	2.537655160	B
	0.3689642	0.9113986	1.1711955	2.5376568	C
	-	0.9114515	1.1712520	2.5376554	D
	0.3689819	0.9113981	1.1711947	2.5376543	E
	-	-	-	2.5376007	F
1,3	2.071879	0.289809	0.605122	2.553718	A
	2.073498060	0.286427070	0.601453030	2.560437284	B
	2.0634978	0.2864272	0.6014531	2.5604401	C
	-	0.2864356	0.6014634	2.5604791	D
	2.0735112	0.2864261	0.6014520	2.5604361	E
	-	-	-	2.5604196	F

Сравнение предложенных подходов показывает, что в случае непрерывного спектра преимущество имеет схема сплайн-аппроксимации нелинейной граничной задачи. Метод сплайн - аппроксимации дает более полную информацию о волновых функциях и их производных, что может быть использовано при вычислении матричных элементов, необходимых для решения задачи трех тел, взаимодействующих по закону Кулона.

Схема, использующая разностную аппроксимацию задачи на собственные значения, имеет преимущество при расчете дискретного спектра. Кроме того, задачи для дискретного и непрерывного спектров в постановке задачи на собственные значения решаются одинаково, что может быть использовано при решении задачи двух центров на комплексной плоскости.

Литература

1. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские функции. М., Наука, 1976.
2. Bates D.R., Ledsham K. and Stewart L.L. Phil. Trans. Roy. Soc. London, Ser A246 (1953) p.215.
3. Wallis R.F. and Hubbert H.M. J. Chem. Phys, 22, 1954, p.774.
4. Wind H. J. Chem. Phys, 42, 1965, p.2371.
5. Madsen M.M., Peek J.M. Atomic Data, 1971, 2, p.171.
6. Ponomarev L.I., Puzynina T.P. Preprint JINR, E4-83-778, Dubna, 1983.
7. Cayford J.K. et al. J.Comp.Phys.16, 1974, p.259.
8. Самарский А.А. Теория разностных схем. М. Наука, 1977.
9. Марчук Г.И., Шайдуров В.В. Повышение точности разностных схем. М. Наука, 1979.
10. Соловьев Е.А. Неадиабатические переходы в атомных столкновениях. Успехи физ.наук, т.157, вып.3, 1989.
11. Виноцкий С.И., Гочева А.Д., Пузынин И.В. ОИЯИ, P11-81-837, Дубна, 1981.
12. Гавурин М.К. Изв. вузов, математика, 1958, т.5/6, с.18.
- Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. ЭЧАЯ, 1973, т.4, вып.1, с.127.
13. Huss R., Kalaba R., Vasudevan R. J.Math.Phys., 1974, 15, 8, p.1285.
14. Жанлав Т., Пузынин И.В., Ракитский А.В. ОИЯИ, P11-88-823, Дубна, 1988.
15. Ponomarev L.I. et al. Annals of Phys., 1978, 110, 2, p.274.
16. Коллатц Л. Функциональный анализ и вычислительная математика. М. Мир, 1969.
17. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л. Методы сплайн - функций. М. Наука, 1980.
18. Жанлав Т. В кн. Приближение сплайнами (Вычислительные системы, вып.106) ИМ СО АН СССР, 1984, с.127.
19. Abramov D.I. and Slavyanov S.Yu. J. Phys. B. Atom. Molec. Phys., 1978, v.11, p.2229.
20. Abramov D.I. et al J.Phys.B. Atom.Molec.Phys., 1979, v.12, p.1761.
21. Баатар Д., Пузынин И.В. ОИЯИ, P5-80-169, Дубна, 1980.
22. Ермаков В.В., Калиткин Н.Н. ЖВММФ, 1987, т.21, 2, с.491.
23. Nakamura H. and Takagi H. Nagaya, IPPJ-AM-16, 1980.
24. Великов В.П., Иванов К.И., Маринов А.Т. ОИЯИ, P4-83-135, Дубна, 1983.
25. Гусев В.В., Федосеев А.И. Препринт ИВФЭ 84-147, Серпухов, 1984.
26. Ponomarev L.I. and Somov L.N. J.Comp.Phys., 1976, v.20, p.183.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 марта 1991 года.

Жанлав Т., Павлов Д.В., Пузынин И.В.
Численное решение задачи двух центров

P11-91-138

Приведены две постановки граничных задач для задачи двух центров. Сформулированные задачи рассматриваются как нелинейное функциональное уравнение, для решения которого применяются непрерывный аналог метода Ньютона и его модификация. Дискретизация задачи осуществляется с помощью методов сплайн-аппроксимации и конечных разностей точности $O(h^4)$, где h — шаг сетки.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1991

Перевод авторов

Zhanlav T., Pavlov D.V., Puzynin I.V.
A Numerical Solution of the Two-Center Problem

P11-91-138

Two different statements of the two-center boundary problem are suggested. The problems stated are considered as a nonlinear functional equation which is solved by the continuous analog of Newton's method, and its modification. The differential equations are approximated by the finite-difference method and the method of spline with an accuracy of the order of $O(h^4)$, where h is the step of a uniform mesh.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1991