

5351

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна



P4 - 5351

Экз. чит. зала

Ф.А. Гареев, С.П. Иванова, Н.Ю. Ширикова

ПРИМЕНЕНИЕ ФУНКЦИЙ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ
ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА
С АНИЗОТРОПНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ
САКСОНА-ВУДСА

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1970

Применение функций Штурма-Лиувилля для решения уравнения Шредингера с анизотропным потенциалом Саксона-Вудса

Предложен метод решения уравнения Шредингера с анизотропным потенциалом конечной глубины для связанных состояний $E < 0$. Одночастичная волновая функция представлена как суперпозиция собственных волновых функций задачи Штурма-Лиувилля. Проблема учёта влияния непрерывного спектра на связанные состояния решается автоматически.

**Препринт Объединенного института ядерных исследований.
Дубна, 1970**

Gareev F.A., Ivanova S.P., Shirikova N.Yu.

P4-5351

Application of the Sturm-Liouville Functions for
Solution of the Schrödinger Equation with the
Anisotropic Saxon-Woods Potential

A method is suggested for solution of the Schrödinger equation with anisotropic potential of finite depth for bound states $E < 0$. A single-particle wave function is represented as a superposition of the wave eigenfunction of the Sturm-Liouville problem. The problem of taking into account the effect of the continuous spectrum on the bound states is solved automatically.

**Preprint. Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1970**

P4 - 5351

Ф.А. Гареев, С.П. Иванова, Н.Ю. Ширикова

**ПРИМЕНЕНИЕ ФУНКЦИЙ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ
ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА
С АНИЗОТРОПНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ
САКСОНА-ВУДСА**

Направлено в журнал "Теоретическая и математическая
физика"

Как известно, наибольшие успехи в объяснении экспериментальных данных в сферических ядрах (распределение заряда в атомном ядре, среднеквадратичный радиус заряда $\sqrt{R_c^2}$, положение одночастичных уровней вблизи поверхности Ферми, дифференциальные сечения в прямых реакциях и т.д.) получены при использовании одночастичной модели с потенциалом Саксона-Вудса. Поэтому этот потенциал применяется в расчётах как для сферических, так и для деформированных ядер, причём в него вводится угловая зависимость. Оказалось, что применение анизотропного потенциала Саксона-Вудса для описания одночастичных и коллективных характеристик деформированных ядер^{/1-5/}, дифференциальных сечений неупругого рассеяния α -частиц и реакций прямого типа приводит к лучшему совпадению с экспериментальными данными^{/6/}, чем в тех случаях, когда используется осцилляторный потенциал бесконечной глубины.

Однако задача нахождения одночастичного спектра и соответствующих ему волновых функций, которые служат базисом почти для всех модельных описаний свойств ядер, в деформированном конечном потенциале сложна.

Уравнение Шредингера с таким потенциалом аналитически не решается. Поэтому обычно его решают численно. Этой задаче посвящен ряд работ ^{/1,7-12/}. В одних работах ^{/1,8,10,12/} волновая функция отыскивалась по решениям уравнения Шредингера со сферически-симметричным потенциалом конечной глубины, что дает хорошее приближение при равновесных значениях параметров деформации для уровней вблизи поверхности Ферми. Для слабо связанных уровней точность приближения ухудшается, т.к. для таких состояний велико влияние непрерывного спектра. В других работах ^{/9,11/} собственные функции гамильтониана с деформированным конечным потенциалом представляются в виде разложения по собственным функциям гамильтониана Нильссона или по функциям гармонического осциллятора. В этих работах авторам удалось обойти проблему непрерывного спектра, т.к. осциллятор имеет только дискретный спектр уровней. Однако скорость сходимости разложения к точному значению не очень велика, поэтому необходимо учитывать вклад большого числа членов, особенно для слабосвязанных состояний. Это понятно, ибо асимптотика волновых функций потенциала конечной глубины имеет вид $\exp(-\alpha r)$, а асимптотика функций гармонического осциллятора - $\exp(-\beta r^2)$.

С проблемой учёта влияния непрерывного спектра приходится сталкиваться при исследовании свойств сферических ядер, когда полной системой функций являются одночастичные волновые функции потенциалов конечной глубины. Примером может служить метод смешивания конфигураций в случае малого числа дискретных уровней.

Целью настоящей статьи является описание метода решения уравнения Шредингера для случая деформированного потенциала конечной глубины с размытым краем для связанных состояний. Волновая функция представлена как суперпозиция собственных волновых функций задачи

Штурма-Лиувилля. Таким образом проблема учёта влияния непрерывного спектра на слабосвязанные состояния снимается, и оказывается, что этот метод обеспечивает максимально возможную быструю сходимость.

§1. Свойства собственных функций $\mathcal{G}_{n\ell}(\tau)$ задачи

Штурма-Лиувилля и метод решения

Выпишем уравнения Штурма-Лиувилля на собственные значения $a_{n\ell}$ и собственные функции $\mathcal{G}_{n\ell}(\tau)$.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{d\tau^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\ell(\ell+1)}{\tau^2} + a_{n\ell} V(\tau) \right] \mathcal{G}_{n\ell}(\tau) = E_{0\ell} \mathcal{G}_{n\ell}(\tau) \quad (1)$$

Полагаем, что $V(\tau) < 0$, т.е. $V(\tau)$ является потенциалом притяжения и $E_{0\ell}$ - фиксированное отрицательное число. Мы требуем, чтобы функции $\mathcal{G}_{n\ell}(\tau)$ удовлетворяли следующим граничным условиям:

$$\mathcal{G}_{n\ell}(\tau) \rightarrow 0 \text{ при } \tau \rightarrow 0 \text{ и } \tau \rightarrow \infty.$$

Если не $E_{0\ell}$, $E_{n\ell}$ - первого возбужденного

Если $a_{0\ell} = 1$ и $E_{0\ell}$ является собственным значением уравнения Шредингера, то $\mathcal{G}_{0\ell}(\tau)$ - функция основного ($n=0$) состояния уравнения Шредингера - будет первой собственной функцией задачи Штурма-Лиувилля, т.е. $\mathcal{G}_{0\ell}(\tau)$ - обычная физическая волновая функция. При фиксированном значении ℓ с ростом a потенциальная яма становится глубже и если мы сможем подобрать такие $a_{n\ell}$, чтобы энергия n -го уровня совпала с $(E_{0\ell})$, то полученная таким образом волновая функция будет собственной функцией $\mathcal{G}_{n\ell}(\tau)$ задачи Штурма-Лиувилля. Собственные числа $a_{n\ell}$ образуют бесконечную последовательность положительных дискретных чисел, удовлетворяющих условию $a_{0\ell} < a_{1\ell} < a_{2\ell} < a_{3\ell} < \dots$ и при $n \rightarrow \infty$ $a_{n\ell} \rightarrow \infty$.

Заметим, что знакоопределенность собственных чисел при $E < 0$ легко получить непосредственно из уравнения (1), переписав его в виде:

$$a_{n\ell} = - \frac{\langle \mathcal{G}_{n\ell} | -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - E_{0\ell} | \mathcal{G}_{n\ell} \rangle}{\int \mathcal{G}_{n\ell}(r) V(r) \mathcal{G}_{n\ell}(r) dr}$$

Матричный элемент в числителе при $E_{0\ell} < 0$ всегда положителен, знак $a_{n\ell}$ определяется знаком $V(r)$. Для $V(r) < 0$ (потенциал притяжения) $a_{n\ell} > 0$, для $V(r) > 0$ (потенциал отталкивания) $a_{n\ell} < 0$.

Итак, уравнение Штурма-Лиувилля подобно уравнению Шредингера, но энергия $E_{0\ell}$ появляется как фиксированный параметр задачи, одинаковый для всех a (ℓ фиксировано, а n принимает следующие значения $0, 1, 2, 3, \dots$) и волновые функции $\mathcal{G}_{n\ell}(r)$ при $n \neq 0$ не являются физическими. Собственные волновые функции $\mathcal{G}_{0\ell}(r)$ задачи Штурма-Лиувилля для состояний $1s, 1p, 1d, 1f, 1g, \dots$ совпадают с волновыми функциями уравнения Шредингера и поэтому следует ожидать, что сходимость ряда $\chi_{n\ell}(r) = \sum_{n=0}^{\infty} d_{n\ell} \mathcal{G}_{n\ell}(r)$ ($\chi_{n\ell}$ - волновая функция уравнения Шредингера) будет наиболее быстрой по сравнению с любыми другими разложениями.

Из эрмитовости гамильтониана задачи Штурма-Лиувилля получаем, что функции $\mathcal{G}_{n\ell}(r)$ ортогональны с весом $V(r)$ при фиксированных ℓ и $E_{0\ell}$, а именно:

$$\int \mathcal{G}_{n\ell}(r) V(r) \mathcal{G}_{n'\ell}(r) dr = -\delta_{n'n} \quad (2)$$

Функции $\psi_{n\ell}^{\Omega}(\vec{r}) = \frac{\mathcal{G}_{n\ell}(r)}{r} y_{\ell}^{\Omega}(\theta, \phi)$, где $y_{\ell}^{\Omega}(\theta, \phi)$ - шаровой спинор, образуют бесконечный, дискретный и полный набор состояний, по которому может быть разложена любая функция $\psi(\vec{r})$, имеющая непрерывную первую производную и удовлетворяющая граничным условиям задачи

Штурма-Лиувилля. Ряд будет сходиться абсолютно и равномерно к $\psi(\vec{r})$ /13/. Отсюда ясно, что разлагать по собственным функциям задачи Штурма-Лиувилля следует только такие функции $\psi(\vec{r})$, которые имеют интегрируемый квадрат, т.к. только при выполнении условия

$$\int \psi^2(\vec{r}) d\vec{r} < A < \infty \quad (3)$$

полученный ряд будет сходиться к $\psi(\vec{r})$. Разумеется, $\mathcal{G}_{n\ell}(\vec{r})$ образуют полный набор только в той области, где $V(\vec{r}) \neq 0$.

Подчеркнем, что в противоположность уравнению Шредингера задача Штурма-Лиувилля не имеет непрерывного спектра (при $V(\vec{r}) < 0$). Следовательно, преимущество разложения по функциям $\mathcal{G}_{n\ell}$ заключается в том, что они представляют собой дискретный ряд функций и поэтому не возникает трудностей с учётом влияния непрерывного спектра на связанные состояния.

В принципе уравнение (1) на собственные значения $\alpha_{n\ell}$ и собственные функции $\mathcal{G}_{n\ell}(\vec{r})$ задачи Штурма-Лиувилля можно решить численно, но если мы хотим в дальнейшем использовать $\mathcal{G}_{n\ell}(\vec{r})$, то лучше представить $\mathcal{G}_{n\ell}(\vec{r})$ в аналитическом виде. Функции $\mathcal{G}_{n\ell}(\vec{r})$ являются осциллирующими ($\mathcal{G}_{0\ell}$ не имеет узла, $\mathcal{G}_{1\ell}$ - 1 узел . . . , $\mathcal{G}_{n\ell}$ - n-узлов) и разложение $\mathcal{G}_{n\ell}(\vec{r})$ по какой-нибудь полной системе может оказаться неэффективным. Наилучшим будет способ, когда из волновой функции $\mathcal{G}_{n\ell}(\vec{r})$ удастся выделить монотонную функцию от r , которая затем разлагается в ряд. Такой метод (модифицированный квазиклассический метод) был разработан в /14/ и применен для аналитической записи волновых функций $\chi_{n\ell}(r)$ уравнения Шредингера со сферически-симметричным потенциалом Саксона-Вудса /15/:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r) \right] \chi_{n\ell}(r) = E_{n\ell} \chi_{n\ell}(r). \quad (4)$$

В качестве нулевого приближения в указанном методе используются волновые функции гармонического осциллятора, а следующее приближение модифицирует волновую функцию так, что учитывается конечность глубины ямы (подробности см. в ^{/15/}). Тогда $\chi_{n\ell}$ можно представить в виде:

$$\chi_{n\ell}(r) = N_{n\ell} (S')^{-1/2} \exp(-S^2/2) H_n(S), \quad (5)$$

где $N_{n\ell}$ - нормировочный множитель, $H_n(S)$ - полином Эрмита, а корректирующая функция $S(r)$ удовлетворяет уравнению:

$$\int_{-\sqrt{E}}^S (E - \sigma)^{1/2} d\sigma = \int_{r_1}^r p(\xi) d\xi, \quad (6)$$

где $p(r) = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} (E_{n\ell} - V(r)) - \frac{(\ell+1/2)^2}{r^2}}$ - квазиклассический импульс.

Как известно, волновая функция в обычном квазиклассическом методе в точке поворота обращается в бесконечность ($\psi \approx \frac{1}{\sqrt{p}}$) и в ее окрестности нельзя пользоваться квазиклассическим приближением ^{/16/}, а необходимо точно решить уравнение Шредингера. Отличительной чертой метода ^{/14/} является непрерывность волновых функций в точках поворота. Это обусловлено выбором корректирующей функции $S(r)$ таким образом, что она обращается в нуль одновременно с функцией $p(r)$. Такое приближение применимо во всей области изменения координат частиц.

Поскольку общий вид волновой функции одночастичного состояния известен (см. (5)), то для ее детального определения необходимо знать лишь корректирующую функцию $S(r)$. Она определяется уравнением (6). Решить это уравнение можно лишь численно. Подстановка численного решения для $S(r)$ в (5) приводит к волновой функции, практически совпадающей (с точностью до 1%) с волновой функцией, полученной путем численного решения уравнения Шредингера. Итак, проблема аналитической

записи волновой функции $\chi_{nl}(\mathbf{r})$ свелась к задаче приближения корректирующей функции $S(\mathbf{r})$. $S(\mathbf{r})$ монотонна и $S(\mathbf{r}) \rightarrow \pm \infty$ при $r \rightarrow \infty$ и $r \rightarrow 0$, соответственно.

В работе /15/ $\tilde{S}(\mathbf{r})$ - приближенная функция $S(\mathbf{r})$ имела вид логарифмической параболы, что позволяло получить волновую функцию в аналитическом виде. Однако более точным будет приближение

$$\tilde{S}(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^N a_n T_n(\mathbf{r}), \quad (8)$$

где вычисление коэффициентов a_n предложено в /17/. Это приближение обладает свойством почти равномерности и дает возможность построить приближение первой и второй производной $S(\mathbf{r})$, используя только значения коэффициентов a_n . Если обозначим $\tilde{S}'(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n T_n(\mathbf{r})$

$$\tilde{S}''(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{N-2} b_n T_n(\mathbf{r}), \quad \text{то /18/ :}$$

$$c_{2n} = \sum_{k=n} 2(2k+1) a_{2k+1}$$

$$c_{2n+1} = \sum_{k=n} 2(2k+2) a_{2k+2}$$

$$b_{2n} = \sum_{k=n} 2(2k+1) c_{2k+1}$$

$$b_{2n+1} = \sum_{k=n} 2(2k+2) c_{2k+2}$$

Заметим, что при $N=20$ значения $\tilde{S}(\mathbf{r})$ отличаются от $S(\mathbf{r})$ в пятом знаке после запятой. Предложенный метод применим без изменений для решения задачи Штурма-Лиувилля.

§2. Сферически-симметричные ядра

Этот параграф содержит описание метода решения уравнения Шредингера для связанных состояний, использующего собственные функции задачи Штурма-Лиувилля $\mathcal{G}_{n\ell}(\tau)$ в качестве полной системы. Выпишем уравнение Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{d\tau^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\ell(\ell+1)}{\tau^2} + V(\tau) \right] \chi_{n\ell_j}(\tau) = E_{n\ell_j} \chi_{n\ell_j}(\tau) \quad (11)$$

с граничными условиями $\chi_{n\ell_j}(\tau) \rightarrow 0$ при $\tau \rightarrow 0$ и $\tau \rightarrow \infty$.

Разложим $\chi_{n\ell_j}(\tau)$ по функциям $\mathcal{G}_{n\ell_j}(\tau)$:

$$\chi_{n\ell_j}(\tau) = \sum_{n'=0}^{\infty} d_{n'\ell_j} \mathcal{G}_{n'\ell_j}(\tau) \quad (12)$$

и подставим это разложение в уравнение Шредингера (11). Прибавим и вычтем $a_{n\ell_j} V(\tau)$, умножим слева на $\mathcal{G}_{n\ell_j}(\tau) V(\tau)$ и проинтегрировав по τ , получаем:

$$(E - E_{0\ell_j}) d_{n\ell_j} + \sum_{n' \neq 0}^{\infty} d_{n'\ell_j} (1 - a_{n'\ell_j}) \int \mathcal{G}_{n\ell_j} V^2(\tau) \mathcal{G}_{n'\ell_j} d\tau = 0. \quad (13)$$

Для решения полученной бесконечной системы уравнений необходимо обрезать суммирование при каком-то фиксированном M . Тогда из условия разрешимости этой системы получаем приближенные собственные значения $E_{n\ell_j}^{(M)}$ и коэффициенты $d_{n\ell_j}^{(M)}$, т.е. собственные функции $\chi_{n\ell_j}^{(M)}$. Увеличивая число членов разложения M , приближаемся к точному значению $E_{n\ell_j}^{\text{точн.}}$. Данный метод решения уравнения Шредингера хорош тем, что полученные приближенные собственные значения $E_{n\ell_j}^{(M)}$ определены с избытком и справедливо равенство /19/

$$E_{nl_j}^{(M)} \geq E_{nl_j}^{(M+1)} \geq E_{nl_j}^{(M+2)} \geq \dots \geq E_{nl_j} + \xi$$

$$\lim_{M \rightarrow \infty} E_{nl_j}^{(M)} = E_{nl_j} + \xi,$$

где E_{nl_j} - точное собственное значение, а ξ - ошибки, связанные с точностью численных расчётов.

Из системы уравнения (13) видно, что когда $a_{0l_j} = 1$, то $d_{0l_j} = 1$. Заметим, что матрица системы (13) является существенно несимметричной и поэтому полученные собственные векторы матрицы будут неортонормальными. Для нахождения собственных значений и векторов несимметричной матрицы применялся метод /20/. Приведем некоторые результаты численных расчётов в потенциале Саксона-Вудса /1/.

При $A = 25$, $R_0 = 1,25 A^{1/3}$ ферми, $V_0 = 53,3$ Мэв, $\kappa = 0,263$ ферми², $1/a = 1,59$ ферми⁻¹ для 2s состояния нейтрона волновая функция $\chi_{10\ 1/2}(\mathbf{r})$ равна:

$$\begin{aligned} \chi_{10\ 1/2}(\mathbf{r}) = & -0,209 \mathcal{G}_{00\ 1/2}(\mathbf{r}) + 1,067 \mathcal{G}_{10\ 1/2}(\mathbf{r}) + 0,226 \mathcal{G}_{20\ 1/2}(\mathbf{r}) + \\ & + 0,105 \mathcal{G}_{30\ 1/2}(\mathbf{r}) + 0,059 \mathcal{G}_{40\ 1/2}(\mathbf{r}) + 0,036 \mathcal{G}_{50\ 1/2}(\mathbf{r}) + 0,023 \mathcal{G}_{60\ 1/2}(\mathbf{r}) + \\ & + 0,015 \mathcal{G}_{70\ 1/2}(\mathbf{r}) + 0,010 \mathcal{G}_{80\ 1/2}(\mathbf{r}) + 0,007 \mathcal{G}_{90\ 1/2}(\mathbf{r}) + 0,004 \mathcal{G}_{10,0\ 1/2}(\mathbf{r}) + \\ & + 0,003 \mathcal{G}_{11,0\ 1/2}(\mathbf{r}) + 0,001 \mathcal{G}_{12,0\ 1/2}(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Для такого же состояния при $A = 109$, $R_0 = 1,24 A^{1/3}$ ферми, $V_0 = 50,5$ Мэв, $\kappa = 0,306$ ферми², $1/a = 1,59$ ферми⁻¹ получаем:

$$\chi_{10\ 1/2}(\mathbf{r}) = -0,059 \mathcal{G}_{00\ 1/2}(\mathbf{r}) + 1,013 \mathcal{G}_{10\ 1/2}(\mathbf{r}) + 0,080 \mathcal{G}_{20\ 1/2}(\mathbf{r}) +$$

$$+ 0,033 \mathcal{G}_{30\ 1/2}(\tau) + 0,017 \mathcal{G}_{40\ 1/2}(\tau) + 0,009 \mathcal{G}_{50\ 1/2}(\tau) + 0,005 \mathcal{G}_{60\ 1/2}(\tau) + \\ + 0,003 \mathcal{G}_{70\ 1/2}(\tau) + 0,002 \mathcal{G}_{80\ 1/2}(\tau).$$

Видим, что подавляющий вклад в волновую функцию $\chi_{10\ 1/2}(\tau)$ дает $\mathcal{G}_{10\ 1/2}(\tau)$, вклад всех остальных компонент $\mathcal{G}_{n0\ 1/2}(\tau)$ вместе взятых меньше 10%. Напомним, что $\chi_{00\ 1/2}(\tau) = \mathcal{G}_{00\ 1/2}(\tau)$. Отсюда ясно, что в пространстве базисных векторов $\mathcal{G}_{n0\ 1/2}(\tau)$ волновые функции $\chi_{00\ 1/2}(\tau) - 1s$ состояния и $\chi_{10\ 1/2}(\tau) - 2s$ состояния неортогональны, неортогональны с весом $V(\tau)$.

На рис. 1 приведены точное значение $E_{10\ 1/2}^{\text{точн.}}$ - энергии $2s$ - состояния и приближенные значения $E_{10\ 1/2}^{(M)}$, вычисленные при разных значениях M . Как указывалось выше, ошибка метода знакоопределения. Следует сказать, что знакоопределенность ошибки не является следствием применения функций Штурма-Лиувилля, а характерной особенностью метода диагонализации.

§3. Одночастичные состояния аксиально-симметричных деформированных ядер

В работах ^{/1/} предложен приближенный, достаточно эффективный метод вычисления одночастичных спектров деформированных ядер. Если сравнить результаты этих расчетов с теми, которые были получены Немировским и Чепурновым ^{/7/} численным интегрированием системы дифференциальных уравнений, то видно, что они практически совпадают для состояний, лежащих вблизи поверхности Ферми ^{/21/}. Однако учёт влияния непрерывного спектра на связанные состояния в ^{/1/} проведен приближенно и поэтому точность вычисления слабосвязанных уровней ($E \approx 0$) невелика. В ряде задач ядерной физики может оказаться важным точное

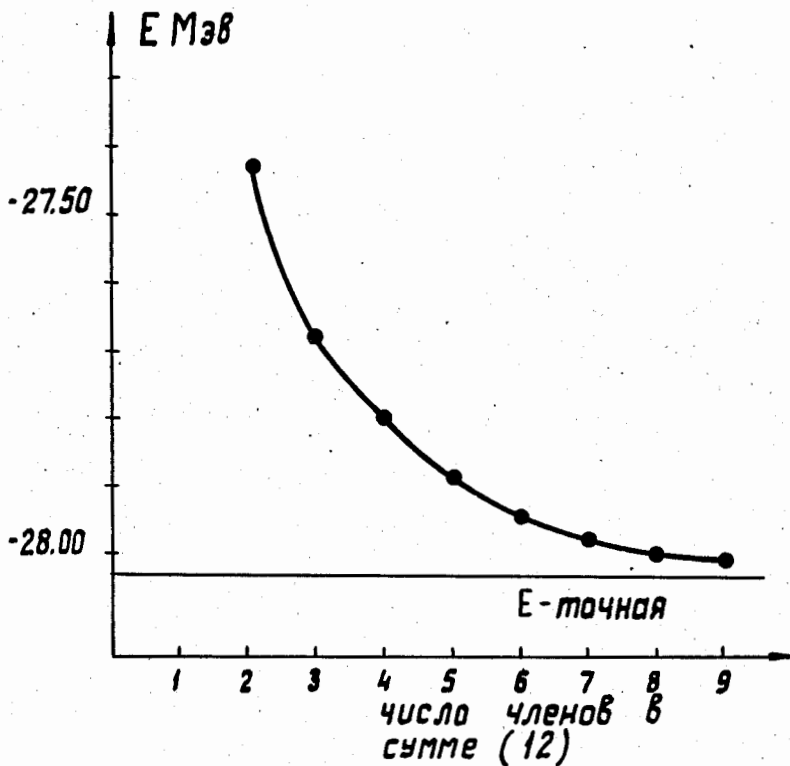


Рис. 1. Точное значение энергии $E^{\text{точн.}}$ и приближенные значения $E^{(M)}$ для 2S состояния нейтрона как функция числа M базисных функций $\varphi_{nl}^{(M)}(r)$ при следующих параметрах потенциала: $A = 109$, $R_0 = 1,24$, $A^{1/3}$ ферми, $V_0 = 50,5$ Мэв, $\kappa = 0,306$ ферми⁻², $1/a = 1,59$ ферми⁻¹.

определение слабосвязанных одночастичных уровней. Опишем метод исследования одночастичных спектров деформированных ядер, обладающий достоинствами метода^{/1/} (аналитический вид волновых функций, необходимость малого машинного времени) и позволяющий учесть влияние непрерывного спектра с очень хорошей точностью.

Будем исходить из предположения о том, что радиус деформированного аксиального ядра зависит от параметров деформации $\beta_{\lambda 0}$ и угла θ относительно оси симметрии.

$$R(\theta) = R_0 \left(1 + \beta_0 + \sum_{\lambda=2}^{\infty} \beta_{\lambda 0} Y_{\lambda 0}(\theta) \right), \quad (14)$$

где R_0 - радиус равновеликого сферического ядра, β_0 - постоянная, введенная для сохранения объема ядра при изменении параметров деформации $\beta_{\lambda 0}$ ^{/22/}. В настоящее время накапливается все больше данных в пользу того, что для ядер редкоземельной и трансурановой областей $\beta_{20} \neq 0$, $\beta_{40} \neq 0$ и $\beta_{60} \approx 0$ ^{/2/}. Поэтому предполагается, что λ принимает только чётные значения. Тогда для ядерного потенциала можно написать:

$$V_{\text{яд.}}(\vec{r}) = -V_0 \{ 1 + \exp[(r - R(\theta))/a] \}^{-1}. \quad (15)$$

Для спин-орбитального взаимодействия следует воспользоваться инвариантной записью^{/23/}

$$V_{s.o.}(\vec{r}) = -\kappa [\vec{p} \cdot \vec{\sigma}] \text{grad } V_{\text{яд.}}(\vec{r}). \quad (16)$$

Обозначая через $V(\vec{r})$ сумму ядерного и кулоновского потенциалов, а также спин-орбитального взаимодействия, выпишем уравнение Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\vec{r}) - E \right] \psi = 0. \quad (17)$$

Будем искать решение этого уравнения в виде суперпозиции по собственным волновым функциям $\mathcal{G}_{n\ell_j}(\vec{r})$ задачи Штурма-Лиувилля

$$\psi_{\Omega, \pi}(\vec{r}) = \sum_{n\ell_j} a_{n\ell_j}^{\Omega} \frac{\mathcal{G}_{n\ell_j}(\vec{r})}{r} y_{\ell_j}^{\Omega}(\theta, \phi) = \sum_{n\ell_j} a_{n\ell_j}^{\Omega} \psi_{n\ell_j}^{\Omega}(\vec{r}). \quad (18)$$

Выполняя аналогичную процедуру, что и в §2, получаем:

$$(E - E_{0\ell_j}) a_{n\ell_j} + \sum a_{n'\ell_j'}^{\Omega} \int (\psi_{n\ell_j}^{\Omega})^* (V(\vec{r}) - a_{n'\ell_j'}^{\Omega} V(\vec{r})) \psi_{n'\ell_j'}^{\Omega} d\vec{r} = 0. \quad (19)$$

Решая систему уравнений (19), можно определить значение E и коэффициентов $a_{n\ell_j}^{\Omega}$ в суперпозиции (18), то есть волновые функции.

В качестве примера рассмотрим решение системы (19) при следующих значениях параметров задачи: $A=25$ - атомный вес, $R_0 = 1,26 A^{1/3}$ ферми, $V_0 = 53,3$ Мэв, $\kappa = 0,263$ ферми²: $1/a = 1,59$ ферми⁻¹.

Результаты расчётов энергий одночастичных состояний при следующих значениях параметра деформации $\beta_{20} = 0,15; 0,25; 0,35; 0,45; 0,55$ приведены в таблице 1. Число N , приведенное в таблице, равно $N = \ell + 2n$ и в расчётах фиксировано; орбитальное квантовое число ℓ меняется от своего наименьшего значения (0 или 1) до ℓ_{\max} . Квантовое число n , определяющее число узлов радиальной волновой функции сферически-симметричного потенциала, меняется от нуля до $n_{\max} = N - \ell_{\max}$.

При $\ell_{\max} = 3$ расчёты проводились для $N = 9, 11, 13$, при этом ранг матрицы системы (19) равен 18, 22, 26, соответственно. Из таблицы видно, что средняя ошибка для всех состояний при равновесных значениях параметра деформации (0,15; 0,25; 0,35) не превосходит 30 кэв. Для глубоко лежащих состояний средняя ошибка менее 5 кэв. Таким образом,

Таблица 1

Сходимость собственных значений энергий (в Мэв) нейтронных
одночастичных состояний ядра $A=125$ в зависимости
от числа базисных функций

Состояние	$N=9$ $\ell_{max}=3$	$N=11$ $\ell_{max}=3$	$N=13$ $\ell_{max}=3$	$N=9$ $\ell_{max}=5$	$N=11$ $\ell_{max}=5$	расчёт по методу ΔV
$1/2^+ [110]$	0,15 -26,280	-26,279	-26,277	-26,280	-26,279	-26,241
$1/2^+ [101]$	0,15 -21,940	-21,942	-21,943	-21,940	-21,942	-21,861
$1/2^+ [330]$	0,15 -2,492	-2,503	-2,504	-2,598	-2,612	-2,710
$3/2^+ [101]$	0,15 -24,746	-24,748	-24,749	-24,746	-24,748	-24,697
$3/2^+ [321]$	0,15 -1,931	-1,937	-1,935	-2,034	-2,042	-1,986
$5/2^+ [312]$	0,15 -0,892	-0,900	-0,911	-0,978	-0,988	-0,881
$1/2^- [110]$	0,25 -26,977	-26,977	-26,975	-26,978	-26,979	-26,850
$1/2^- [101]$	0,25 -21,414	-21,419	-21,422	-21,415	-21,420	-21,214
$1/2^- [330]$	0,25 -3,413	-3,462	-3,497	-3,677	-3,736	-3,726
$3/2^- [101]$	0,25 -24,256	-24,260	-24,262	-24,257	-24,261	-24,124
$3/2^- [321]$	0,25 -2,386	-2,407	-2,418	-2,660	-2,690	-2,445
$5/2^- [312]$	0,25 -0,627	-0,646	-0,671	-0,871	-0,895	-0,576
$1/2^- [110]$	0,35 -27,667	-27,673	-27,672	-27,670	-27,677	-27,408
$1/2^- [101]$	0,35 -20,780	-20,788	-20,793	-20,785	-20,793	-20,410
$1/2^- [330]$	0,35 -4,311	-4,424	-4,518	-4,768	-4,899	-4,646
$3/2^- [101]$	0,35 -23,737	-23,743	-23,745	-23,741	-23,748	-23,477
$3/2^- [321]$	0,35 -2,752	-2,798	-2,829	-3,261	-3,326	-2,798
$5/2^- [312]$	0,35 -0,301	-0,335	-0,376	-0,782	-0,825	-0,196
$1/2^- [110]$	0,45 -28,312	-28,329	-28,331	-28,322	-28,340	-27,888
$1/2^- [101]$	0,45 -20,070	-20,081	-20,089	-20,081	-20,094	-19,483
$1/2^- [330]$	0,45 -5,135	-5,332	-5,504	-5,795	-6,022	-5,450
$3/2^- [101]$	0,45 -23,187	-23,197	-23,200	-23,199	-23,211	-22,754
$3/2^- [321]$	0,45 -2,992	-3,069	-3,127	-3,781	-3,891	-3,030
$5/2^- [312]$	0,45 0,095	0,043	-0,016	-0,692	-0,758	0,260
$1/2^- [110]$	0,55 -28,891	-28,924	-28,935	-28,911	-28,947	-28,281
$1/2^- [101]$	0,55 -19,294	-19,311	-19,321	-19,320	-19,339	-18,450
$1/2^- [330]$	0,55 -5,841	-6,136	-6,403	-6,702	-7,040	-6,118
$3/2^- [101]$	0,55 -22,604	-22,619	-22,624	-22,633	-22,650	-21,953
$3/2^- [321]$	0,55 -3,078	-3,190	-3,281	-4,173	-4,337	-3,126
$5/2^- [312]$	0,55 0,572	0,501	0,419	-0,580	-0,673	0,790

при $\beta_{20}=0,15; 0,25; 0,35$ сходимость собственных значений энергии по радиальному квантовому числу n достаточно быстрая и уже при $n=8$ достигается высокая точность (средняя ошибка менее 30 кэВ).

Изменение собственных значений при включении в (18) следующего орбитального квантового числа ℓ ($\ell_{\max}=5$) для глубоко лежащих состояний $1/2^- [110], 1/2^- [101], 3/2^- [101]$ при равновесных значениях параметра β_{20} менее 5 кэВ. Для слабо связанных состояний $1/2^- [330], 3/2^- [321], 5/2^- [312]$ это изменение возрастает от 100 до 500 кэВ при увеличении деформации от 0,15 до 0,35. Интересно заметить, что хотя вклад волн $\ell=5$ в собственное значение достигает 0,5 МэВ при $\beta_{20}=0,35$, тем не менее относительный вес коэффициента смешивания этих волн мал и составляет $\leq 3\%$. Вклад волн с $\ell=7$ при равновесных деформациях в среднем меньше 20 кэВ, поэтому можно считать, что уже при $N=11$ и $\ell_{\max}=5$ достигнута хорошая точность.

Следует обратить внимание на то, что даже при очень больших деформациях $\beta_{20}=0,45; 0,55$ вклад волн с $\ell=5$ в собственные значения энергии для сильно связанных состояний мал и в среднем < 30 кэВ. Для слабо связанных состояний этот вклад велик и доходит до 1,1 МэВ, что указывает на необходимость включения волн с $\ell=7$. (Включение волн с $\ell=7$ дает вклад в энергию 100+200 кэВ). Итак, данный метод применим и при больших значениях параметра деформации,

В последнем столбце таблицы 1 приведены результаты расчётов собственных значений энергий, проведенные по методу ^{/1/}. Видно, что результаты вычислений по методу, описанному в ^{/1/}, и данному практически совпадают при равновесных значениях параметров деформации, однако, для слабосвязанных состояний при больших β_{20} расхождение может достигать 2 МэВ.

Заключение

Таким образом, предложен метод решения уравнения Шредингера с анизотропным потенциалом конечной глубины для связанных состояний $E < 0$. Скорость сходимости полученных собственных значений энергий к точным велика (малое машинное время счёта). Данный метод применим и для малых и для больших значений параметров деформаций β_{20} . Основным достоинством метода является то, что удастся учесть влияние непрерывного спектра с любой точностью.

При применении данного метода для вычисления одночастичных характеристик в тяжелых деформированных ядрах время счёта (т.е. скорость сходимости) можно значительно сократить двумя способами:

1) выбирая в качестве базиса функций \mathcal{G}_{nlj} такие, для которых в (18) все $a_{nlj}^{\Omega} = 1$ при $n = 0, 1, n_{max}$ за исключением тех a_{nlj}^{Ω} , где $n > n_{max}$ или 2) выбирая в качестве базисных функций собственные функции задачи Штурма-Лиувилля \mathcal{G}_{nlj} , совпадающие с физическими функциями у поверхности Ферми.

Авторы признательны В.Г. Соловьеву, З. Бохнацкому, В.Б. Беляеву за интерес к работе и полезные обсуждения.

Когда рукопись данной статьи была готова к печати, появилась работа /24/, посвященная этой же тематике.

Литература

1. Ф.А. Гареев, С.П. Иванова, Б.Н. Калинин. Препринт ОИЯИ Р4-3451. Дубна (1967); Известия АН СССР, сер. физ., **32**, 1690, 1968.
Ф.А. Гареев, С.П. Иванова, Б.Н. Калинин, С.К. Слепнев, М.Г. Гинзбург. Препринт ОИЯИ Р4-3607, Дубна (1967).

2. F.A. Gareev, S.P. Ivanova, V.V. Pashkevitch. JINR Preprint E4-4704, Dubna (1969).
3. Ф.А. Гареев, Б.Н. Калинин, Н.И. Пятов, М.И. Черней. ЯФ, 8, 305, (1968); Ф.А. Гареев, С.П. Иванова, М.И. Черней. ЯФ, 9, 308 (1969).
4. В.Г. Соловьев. Обзорный доклад, представленный на международный симпозиум по структуре ядра, Дубна, 1968; Л.А. Малов, В.Г. Соловьев, У.М. Файнер. Изв. АН СССР, сер. физ., 38, 1244 (1969); ДАН СССР, 186, 299 (1969); А.А. Корнейчук, Л.А. Малов, В.Г. Соловьев, С.И. Федотов, Г. Шульц. ЯФ, 9, 750 (1969); Л.А. Малов, В.Г. Соловьев, С.И. Федотов. ДАН СССР, 189, 931 (1969).
5. Ф.А. Гареев, С.П. Иванова. Препринт ОИЯИ Р4-5221, Дубна, 1970.
6. С.И. Дроздов. ЯФ, 1, 407 (1965).
D.L. Hendrie, N.K. Glendenning, B.G. Harvey, O.N. Jarvis, H.H. Duhm, J. Saudinos, I. Mahoney. Phys.Lett., 26B, 127 (1968).
H. Schulz, H.I. Wiebicke. Phys.Lett., 29B, 18 (1969).
7. П.Э. Немировский, В.А. Челурнов. ЯФ, 3, 998 (1966).
8. A. Faessler, R. Sheline. Phys.Rev., 148, 1003 (1966).
9. P. Ropper. Zf. Phys., 195, 316 (1966).
J.H. Vogeler, Nucl.Phys., A133, 289 (1969).
10. E. Rost, Phys.Rev., 154, 994 (1967).
11. В.В. Пашкевич, В.М. Струтинский. Препринт ОИЯИ Р2-3857, Дубна, (1968).
12. B.L. Anderson. Nucl.Phys., A112, 443 (1968).
13. Р. Курант, Д. Гильберт. Методы математической физики, том. 1, гос-техиздат, М., 1951.
14. М.И. Петрашень. Уч. Записки ЛГУ, сер. физ. наук, 7, 59 (1949);
S.C. Miller, R.H. Good, Phys.Rev., 91, 174 (1953).

15. Б.Н. Калинин, Я. Грабовский, Ф.А. Гареев.
Acta Phys. Polonica. XXX, 999 (1966).
16. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Физматгиз (1963).
А.С. Давыдов. Квантовая механика. Физматгиз (1968).
17. А.А. Корнейчук, Н.Ю. Ширикова. ЖВМ и МФ, 7, 14 (1967).
18. С.W. Clenshaw, "A note on the summation of Chebyshev series";
MTAC, 9, 118 (1955). L. Fox, I.B. Parker, "Chebyshev Polynomials in Numerical Analysis". Oxford University Press (1966).
19. Л.В. Канторович, В.И. Крылов. Приближенные методы высшего анализа. Издательство технико-теоретической литературы. Москва-Ленинград (1952); С.Г. Михлин. Вариационные методы в математической физике. Издательство технико-теоретической литературы. Москва (1957).
20. P.I. Eberlein, J. Soc. Indust. Appl. Math., v.10, N1, 1962.
21. Ф.А. Гареев, С.П. Иванова, Б.Н. Калинин.
Acta Phys. Polonica, 33, 135 (1968).
22. Ф.А. Гареев, С.П. Иванова, Н.Ю. Ширикова. Препринт ОИЯИ Р4-4259, Дубна (1969).
23. V.A. Chepurinov, P.E. Nemirovsky. Nucl. Phys., 49, 90 (1963).
Ф.А. Гареев, С.П. Иванова, Б.Н. Калинин. Препринт ОИЯИ Р4-3325, Дубна (1967).
24. V.L. Anderson, V.B. Back, J.M. Bang. Nucl. Phys., A147, 33(1970).

Рукопись поступила в издательский отдел

25 августа 1970 года.