

5/iv-71

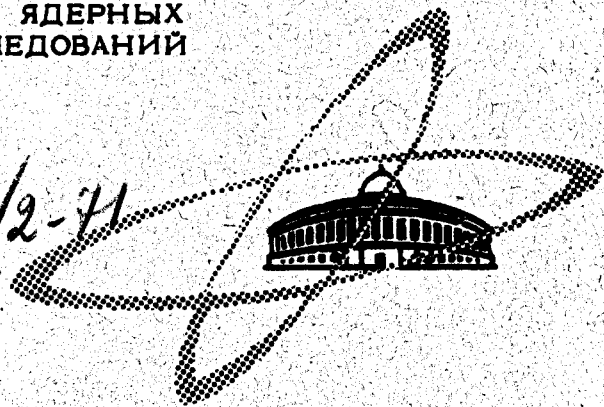
Г-202

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P 4- 5639

1016/2-71



Ф. А. Г ареев

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ВЫДЕЛЕНИЕ ДВИЖЕНИЯ  
ЦЕНТРА МАСС В ДВУХЧАСТИЧНОЙ  
ОБОЛОЧЕЧНОЙ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ  
ПОТЕНЦИАЛА КОНЕЧНОЙ ГЛУБИНЫ

1971

P 4-5639

Ф.А.Гареев

ВЫДЕЛЕНИЕ ДВИЖЕНИЯ  
ЦЕНТРА МАСС В ДВУХЧАСТИЧНОЙ  
ОБОЛОЧЕЧНОЙ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ  
ПОТЕНЦИАЛА КОНЕЧНОЙ ГЛУБИНЫ

Направлено в "Acta Physica Polonica"

Объединенный институт  
ядерных исследований  
БИБЛИОТЕКА

Как известно, в модели оболочек движение всех нуклонов рассматривается относительно некоторой фиксированной точки пространства. Поэтому оказывается, что центр масс ядра в состояниях, описываемых волновыми функциями этой модели, испытывает колебательные движения <sup>/1/</sup>. Эти колебания являются нефизическими и поэтому соответствующие им состояния называются ложными. Ряд работ посвящен проблеме выделения центра масс ядра из оболочечной волновой функции <sup>/2/</sup> и в них предложены методы построения правильных оболочечных функций. Однако эти методы дают одинаковые результаты только в случае осцилляторного гармонического потенциала <sup>/3/</sup>.

Что касается модели оболочек с произвольным потенциалом конечной глубины (например, потенциал Саксона-Вудса), когда в гамилтониане нельзя разделить внутренние переменные и координаты центра масс, вопрос о точном выделении ложных состояний остается нерешенным.

Однако заметим, что в последнее время были предложены приближенные методы /4,5/ исключения ложных состояний, пригодные только для малых возбуждений ядра. Метод /4/ использует то, что движение центра масс является единственным коллективным движением, не связанным с внутренним, если гамильтониан системы частиц обладает свойством трансляционной инвариантности. Поэтому одночастичный гамильтониан записывается в трансляционно инвариантной форме. В такой модели оболочек нуклоны движутся не относительно некоторой фиксированной точки пространства, а относительно центра масс. Для выделения движения центра масс к трансляционно инвариантному гамильтониану добавляется потенциал, подобранный подходящим образом так, чтобы зафиксировать положение центра масс ядра. Гамильтониан центра масс и внутренняя часть нового гамильтониана коммутируют. К сожалению, этот метод мало пригоден для конкретных расчетов и точность метода зависит от добавленного потенциала.

В работе /5/ предложен метод выделения из двухчастичной волновой функции потенциала конечной глубины только части функций, зависящей от относительной координаты и имеющей угловой момент  $l$ , равный нулю (relative-angular-momentum zero part). К сожалению, этот метод трудно обобщить для полного разделения переменных  $\vec{r}$  и  $\vec{R}$  ( $\vec{R}$  - координата центра масс).

В /6/ оболочечная двухчастичная функция потенциала Саксона-Вудса разлагается в ряд по полной системе функций, зависящих от координаты центра масс  $\vec{R}$ , причем базисные функции являются решениями уравнения Шредингера с потенциалом Саксона-Вудса  $V(\vec{R})$ . Этот метод удобен для расчетов, однако учет влияния непрерывного спектра произведен приближенно. Поэтому для слабосвязанных состояний точность расчетов невелика. Заметим, что при применении потенциалов конечной глубины возникает необходимость учета влияния непрерывного

спектра. Особенно важно влияние непрерывного спектра на связанные состояния в методе смешивания конфигураций, когда в среднем поле ядра имеется мало дискретных уровней. С этой же проблемой приходится сталкиваться при решении уравнения Шредингера с деформированным потенциалом конечной глубины, когда волновая функция — суперпозиция собственных функций гамильтониана со сферически симметричным потенциалом /7/. Оказывается, что проблему учета влияния непрерывного спектра на связанные состояния можно решить /8,9/, если волновую функцию разложить по собственным волновым функциям  $G_{Nl}(R)$  задачи Штурма-Лиувилля.

В этой статье предлагается метод разделения внутренних переменных и координаты центра масс двухчастичной оболочечной волновой функции для произвольного конечного потенциала. Волновая функция центра масс представлена в виде суперпозиции собственных волновых функций задачи Штурма-Лиувилля. Таким путем снимается проблема учета непрерывного спектра и поэтому выделение внутренних переменных может быть сделано с любой степенью точности.

### §1. Разделение переменных в уравнении Шредингера в случае двух частиц

Во многих вычислениях в ядерной физике используются двухчастичные оболочечные волновые функции. Примером могут служить вычисления матричных элементов от двухчастичных взаимодействий, изучение двухнуклонных корреляций в ядрах и прямых двухнуклонных реакций передач в рамках метода искаженных волн. Обычно оболочечная волновая функция является произведением одночастичных волновых функций, зависящих от координат всех частиц /1/. Использование таких оболочечных функций упрощается, если волновая функция представлена как произведение функций, зависящих от координат центра масс и внутренних переменных.

Выпишем гамильтониан:

$$H(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 + V(r_1) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 + V(r_2). \quad (1)$$

Мы предполагаем, что потенциалы  $V(r_i)$  являются центрально-симметричными без спин-орбитального взаимодействия. В гамильтониане (1) переменные  $\vec{r}_1$  и  $\vec{r}_2$  разделены, поэтому двухчастичную оболочечную волновую функцию можем записать в виде:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_{n_1 l_1 m_1}(\vec{r}_1) \Psi_{n_2 l_2 m_2}(\vec{r}_2). \quad (2)$$

Введем вместо радиусов-векторов частиц  $\vec{r}_1$  и  $\vec{r}_2$  новые переменные  $\vec{r}$  и  $\vec{R}$ :

$$\vec{r} = \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{\sqrt{2}}, \quad \vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{\sqrt{2}}. \quad (3)$$

Такая замена переменных имеет преимущества по сравнению с заменой /10/, так как соотношение (3) дает одинаковую по форме волновую функцию, зависящую от  $\vec{r}$  и  $\vec{R}$  /11/. Используя (3), перепишем гамильтониан (1) в виде:

$$H(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} + V(R) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} + U(\vec{r}, \vec{R}) \equiv H(\vec{r}, \vec{R}), \quad (4)$$

$$U(\vec{r}, \vec{R}) = V\left(\left|\frac{\vec{R} - \vec{r}}{\sqrt{2}}\right|\right) + V\left(\left|\frac{\vec{R} + \vec{r}}{\sqrt{2}}\right|\right) - V(R). \quad (5)$$

Если  $U(\vec{r}, \vec{R}) = \text{const}$  или функция относительных координат  $\vec{r}$ , то задача разделения переменных  $\vec{R}$  и  $\vec{r}$  решена. Однако такая ситуация встречается только при применении постоянного или осциллирующего потенциала.

В обозначениях (3) уравнение Шредингера имеет вид:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{R}} + V(\mathbf{R}) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r}, \vec{\mathbf{R}}) \right] \Psi_{\mu}(\mathbf{r}, \vec{\mathbf{R}}) = E_{\mu} \Psi_{\mu}(\mathbf{r}, \vec{\mathbf{R}}). \quad (6)$$

Чтобы решить уравнение (6), нужно определить граничные условия на  $\Psi_{\mu}(\mathbf{r}, \vec{\mathbf{R}})$ . Мы предположим, что  $E_{\mu} < 0$  и  $\Psi_{\mu}(\mathbf{r}, \vec{\mathbf{R}})$  удовлетворяет следующим требованиям:

$$\int \Psi_{\mu}^2(\mathbf{r}, \vec{\mathbf{R}}) d\vec{\mathbf{r}} < A < \infty, \quad (7)$$

$$\int \Psi_{\mu}^2(\mathbf{r}, \vec{\mathbf{R}}) d\mathbf{R} < B < \infty. \quad (8)$$

Условие (7) означает, что частицы не могут удалиться на бесконечное расстояние друг от друга, а (8) — что движение центра масс локализовано в пространстве.

При выполнении условия (8) двухчастичную оболочечную волновую функцию  $\Psi_{\mu}(\mathbf{r}, \vec{\mathbf{R}})$  можно разложить по волновым функциям Штурма-Лиувилля  $G_{NL}$ :

$$\Psi_{\mu}(\mathbf{r}, \vec{\mathbf{R}}) = \sum_{n\ell m NLM} b_{NLM}^{n\ell m} \frac{\chi_{n\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}\left(\frac{\vec{\mathbf{r}}}{r}\right) \frac{G_{NL}(R)}{R} Y_{LM}\left(\frac{\vec{\mathbf{R}}}{R}\right). \quad (9)$$

Свойства собственных функций задачи Штурма-Лиувилля известны достаточно хорошо <sup>/8,9/</sup>. Поэтому мы ограничимся указанием на то, что удобно применить функции  $G_{NL}$  в качестве полной системы, поскольку они представляют дискретный ряд функций. Поэтому трудности с учетом влияния непрерывного спектра не возникают.

Выпишем уравнение Штурма-Лиувилля на собственные значения  $a_{NL}$  и собственные функции  $G_{NL}(R)$ :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dR^2} + \frac{\hbar}{2m} \frac{L(L+1)}{R^2} + a_{NL} V(R) \right] G_{NL}(R) = E_{OL} G_{NL}(R). \quad (10)$$

Мы требуем, чтобы функции  $G_{NL}(R)$  удовлетворяли следующим граничным условиям:  $G_{NL}(R) \rightarrow 0$  при  $R \rightarrow 0$  и  $R \rightarrow \infty$ . При  $V(R) < 0$  и  $E_{0L} < 0$  собственные числа  $a_{NL}$  образуют бесконечную последовательность положительных дискретных чисел, удовлетворяющих условию:  $a_{0L} < a_{1L} < a_{2L} \dots$  при  $N \rightarrow \infty$   $a_{NL} \rightarrow \infty$ . Уравнение (10) с произвольным потенциалом  $V(R)$  аналитически не решается, поэтому для нахождения функций  $G_{NL}(R)$  приходится пользоваться численными методами [8]. В дальнейшем  $G_{NL}(R)$  будем считать известной функцией. Функции  $G_{NL}(R)$  ортогональны с весом  $V(R)$ :

$$\int G_{N'L}(R) V(R) G_{NL}(R) dR = -\delta_{N'N} \quad (11)$$

Подставим (9) в (6), умножим слева на  $G_{N_0 L_0}(R) Y_{L_0 M_0}(\frac{\vec{R}}{R}) V(R) \times Y_{\ell_0 m_0}(\frac{\vec{r}}{r})$ , прибавим и вычтем  $a_{NL} V(R)$ , проинтегрируем по переменным  $R, \frac{R}{r}, \frac{\vec{r}}{r}$  и получим:

$$\begin{aligned} & \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell_0(\ell_0+1)}{r^2} + (E_{0L_0} - E_\mu) \right] \sum_n b_{N_0 L_0 M_0}^{n \ell_0 m_0} \chi_{n \ell_0}(r) + \\ & + \sum_{N_n} (a_{NL_0} - 1) b_{NL_0 M_0}^{n \ell_0 m_0} \chi_{n \ell_0}(r) \int G_{N_0 L_0}(R) V^2(R) G_{NL_0}(R) dR - \\ & - \sum_{\substack{N_{LM} \\ n \ell m}} b_{N_{LM}}^{n \ell m} \chi_{n \ell}(r) \int G_{N_0 L_0} Y_{L_0 M_0} Y_{\ell_0 m_0} V(R) U(\vec{r}, \vec{R}) G_{NL} Y_{LM} Y_{\ell m} dR d\Omega_R d\Omega_r \end{aligned} \quad (12)$$

Итак, мы имеем систему интегро-дифференциальных уравнений второго порядка на собственные функции  $\chi_{n \ell}(r)$  и на собственные значения  $E_\mu$  относительного движения. Эта система имеет преимущества по сравнению с уравнением (6), поскольку в ней не содержатся координаты центра масс и суммирование включает только дискретные числа  $N$  (точнее,  $a_{NL}$ ). Поэтому выделение движения центра масс может быть выполнено с любой степенью точности.



Однако в системе (12) осталось еще интегрирование по непрерывному спектру относительного движения. Очень часто достаточно знать только состояния дискретного спектра, а тогда собственные функции задачи Штурма-Лиувилля образуют полный набор. Поэтому предположим, что волновая функция  $\Psi_{\mu}(\vec{r}, \vec{R})$  обладает свойством квадратичной интегрируемости по координате относительно движения, т.е.

$$\int \chi_{n\ell}^2(r) dr < C < \infty$$

В этом случае волновую функцию  $\Psi_{\mu}(\vec{r}, \vec{R})$  можно записать в виде:

$$\Psi_{\mu}(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_{NLMn\ell m} a_{NLM}^{n\ell m} \frac{S_{n\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}\left(\frac{\vec{r}}{r}\right) \frac{G_{NL}(R)}{R} Y_{LM}\left(\frac{\vec{R}}{R}\right). \quad (13)$$

Функции  $S_{n\ell}(r)$  удовлетворяют следующему уравнению:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \beta_{n\ell} V(r) \right] S_{n\ell}(r) = E_{0\ell} S_{n\ell}(r) \quad (14)$$

с граничными условиями  $S_{n\ell}(r) \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow 0$  и  $r \rightarrow \infty$ .

Подставим (13) в (6), прибавим и вычтем  $\alpha_{NL} V(R) + \beta_{n\ell} V(r)$ , умножим слева на  $S_{n_0\ell_0}(r) Y_{\ell_0 m_0}\left(\frac{\vec{r}}{r}\right) G_{N_0 L_0}(R) Y_{L_0 M_0}\left(\frac{\vec{R}}{R}\right) V(r) V(R)$  и проинтегрируем по  $\vec{r}, R$ . Используя ортогональность базисных функций,

получаем:  $(E_{\mu} - E_{0L_0} - E_{0\ell_0}) a_{N_0 L_0 M_0}^{n_0 \ell_0 m_0} -$

$$\begin{aligned} & - \sum_n a_{N_0 L_0 M_0}^{n \ell_0 m_0} \beta_{n\ell_0} \int S_{n_0\ell_0}(r) V^2(r) S_{n\ell_0}(r) dr + \sum_N (1 - \alpha_{NL_0}) a_{NL_0 M_0}^{n_0 \ell_0 m_0} \int G_{N_0 L_0}(R) \times \\ & \times V^2(R) G_{NL_0}(R) dr - \sum_{\substack{NLM \\ n\ell m}} a_{NLM}^{n\ell m} \int G_{N_0 L_0} S_{n_0\ell_0} Y_{L_0 M_0} Y_{\ell_0 m_0} V(r) V(R) U(\vec{r}, R) G_{NL} S_{n\ell} Y_{LM} Y_{\ell m} \times \\ & \times dr dR d\Omega_r d\Omega_R. \end{aligned} \quad (15)$$

Таким образом, вместо системы интегро-дифференциальных уравнений (12) мы получили систему алгебраических уравнений (15). Из

условия разрешимости системы (15) относительно коэффициентов  $a_{NLM}^{nlm}$  получаем собственные значения  $E_{\mu}$  задачи (1), а подставляя  $a_{NLM}^{nlm}$  в (13), получим двухнуклонную оболочечную волновую функцию  $\Psi_{\mu}(\vec{r}, R)$ .

Для решения полученной бесконечной системы уравнений необходимо обрезать суммирование при каком-то фиксированном  $\nu$  ( $\nu$  - число слагаемых в сумме (13)). Тогда из условия разрешимости этой системы получаем приближенные собственные значения  $E_{\mu}^{(\nu)}$  и коэффициенты  $a_{NLM}^{nlm}(\nu)$ , т.е. собственные функции  $\Psi_{\mu}^{(\nu)}(\vec{r}, R)$ . Увеличивая число членов разложения  $\nu$ , приближаемся к точному значению  $E_{\mu}^{\text{точн.}}$ . Данный метод решения уравнения Шредингера хорош тем, что полученные приближенные собственные значения  $E_{\mu}^{(\nu)}$  определены с избытком и справедливо неравенство /12/.

$$E_{\mu}^{(\nu)} \geq E_{\mu}^{(\nu+1)} \geq E_{\mu}^{(\nu+2)} \geq \dots \geq E_{\mu} + \xi$$

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} E_{\mu}^{(\nu)} = E_{\mu} + \xi,$$
(16)

где  $E_{\mu}$  - точное собственное значение, а  $\xi$  - ошибки, связанные с точностью численных расчетов.

Таким образом, полученная система алгебраических уравнений содержит только суммирование по дискретным квантовым числам и точность нахождения собственных значений  $E_{\mu}^{(\nu)}$  и волновых функций  $\Psi_{\mu}^{(\nu)}(\vec{r}, R)$  зависит от числа  $\nu$  учитываемых членов в (15). При увеличении их выделение движения центра массы можно произвести с любой желаемой степенью точности.

## §2. Численные результаты

Ясно, что решить систему уравнений (15) можно только численно. В принципе система уравнений (15) проста для численного решения, за

исключением последнего члена, где интегрирование нужно провести по шести независимым переменным. Число переменных интегрирования можно уменьшить до трех, если воспользоваться свойствами симметрии потенциала  $U(\vec{r}, \vec{R})$ .

Вспомним, что  $U(\vec{r}, \vec{R})$  имеет вид:

$$U(\vec{r}, \vec{R}) = V\left(\left|\frac{\vec{R}-\vec{r}}{\sqrt{2}}\right|\right) + V\left(\left|\frac{\vec{R}+\vec{r}}{\sqrt{2}}\right|\right) - V(R) \equiv W(\vec{r}, \vec{R}) - V(R),$$

где

$$\begin{aligned} W(\vec{r}, \vec{R}) &= V\left(\left|\frac{\vec{R}-\vec{r}}{\sqrt{2}}\right|\right) + V\left(\left|\frac{\vec{R}+\vec{r}}{\sqrt{2}}\right|\right) \\ |\vec{R}-\vec{r}| &= (R^2 + r^2 - 2Rr \cos \theta)^{\frac{1}{2}} \\ |\vec{R}+\vec{r}| &= (R^2 + r^2 + 2Rr \cos \theta)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (17)$$

а  $\theta$  - угол между векторами  $\vec{R}$  и  $\vec{r}$ .

Разложим  $W(\vec{r}, \vec{R})$  по полной системе сферических функций  $Y_\lambda(\theta)$

$$W(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_{\lambda} C_{\lambda}(r, R) Y_{\lambda}(\theta). \quad (18)$$

Поскольку  $\cos(-\theta + \pi) = -\cos \theta$ , то  $W(\vec{r}, \vec{R})$  инвариантно относительно преобразования  $\theta \rightarrow -\theta + \pi$ , следовательно, в (18) все

$\lambda$  - четные. Разумеется, коэффициенты разложения  $C_{\lambda}(r, R)$  находятся путем численного интегрирования:

$$C_{\lambda}(r, R) = \int Y_{\lambda}^*(\theta) W(\vec{r}, \vec{R}) d\Omega. \quad (19)$$

Для вычисления угловой части матричного элемента от  $W(\vec{r}, \vec{R})$  воспользуемся соотношением:

$$Y_{\lambda}(\theta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\lambda+1}} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} Y_{\lambda\mu}^* \left( \frac{\vec{R}}{R} \right) Y_{\lambda\mu} \left( \frac{\vec{r}}{r} \right). \quad (20)$$

Тогда получаем:

$$\begin{aligned} & \langle Y_{L_0 M_0} \left( \frac{\vec{R}}{R} \right) Y_{\ell_0 m_0} \left( \frac{\vec{r}}{r} \right), Y_{\lambda}(\theta) Y_{LM} \left( \frac{\vec{R}}{R} \right) Y_{\ell m} \left( \frac{\vec{r}}{r} \right) \rangle = \\ & = \left\{ \frac{(2\lambda+1)(2L_0+1)(2\ell+1)}{4\pi(2L+1)(2\ell_0+1)} \right\}^{1/2} (L_0 \lambda 0 0 | L 0) (\lambda \ell 0 0 | \ell_0 0) \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} (L_0 \lambda M_0 \mu | LM) \times \\ & \quad \times (\lambda \ell \mu m | \ell_0 m_0) \end{aligned} \quad (21)$$

Итак, интегрирование по угловым переменным свелось к вычислению коэффициентов Клебша-Гордона, остается только интегрирование по  $R$  и  $r$ .

Последний член в (15) содержит суммирование по магнитным квантовым числам  $M$  и  $m$ . Для упрощения решения системы (15) усредним его по  $M$  и  $m$  и обозначим через  $u_{N_0 L_0 M_0 n_0 \ell_0 m_0}^{N L m}$ . Тогда:

$$u_{N_0 L_0 n_0 \ell_0}^{N L n \ell} = \frac{1}{(2L+1)(2\ell+1)} \sum_{m M} u_{N_0 L_0 M_0 n_0 \ell_0 m_0}^{N L M n \ell m}. \quad (22)$$

Приближение (22) позволяет уменьшить ранг матрицы системы (15) при данных  $\ell$  и  $L$  в  $(2\ell+1)(2L+1)$  раз. Тогда полученные состояния вырождены по магнитным квантовым числам.

Заметим, что матрица системы (15) является существенно несимметричной и поэтому полученные собственные векторы матрицы будут неортогональны. Для нахождения собственных значений и векторов несимметричной матрицы применялся метод <sup>13/</sup>. Приведем некоторые результаты численных расчетов в потенциале Саксона-Вудса:

$$V(r) = - \frac{V_0}{1 + \exp[(r-R_0)a]} \quad (24)$$

при следующих значениях параметров:  $A = 16$ ,  $R_0 = 1,25 A^{1/3}$  ферми,  $V_0 = 53,3$  Мэв,  $\alpha = 1,59$  ферми.<sup>-1</sup>.

Из таблицы 1 видно, что скорость сходимости  $a_{NL}^{n\ell}$  коэффициентов смешивания волновых функций очень велика. Например, состояния с энергией - 35,595 Мэв и - 65,830 Мэв имеют только по одному коэффициенту смешивания  $a_{11}^{11} = 1$  и  $a_{00}^{00} = 1$ , соответственно. Поэтому можно сказать, что для сильно связанных состояний коэффициенты смешивания  $a_{NL}^{n\ell}$  волновых функций относительного движения и движения центра масс в потенциале Саксона-Вудса близки к коэффициентам Мошинского для осцилляторных волновых функций. Для слабосвязанных состояний скорость сходимости  $a_{NL}^{n\ell}$  медленнее в случае потенциала Саксона-Вудса, чем для потенциала гармонического осциллятора.

### Заключение

Таким образом, предложен метод выделения движения центра масс в двухчастичной оболочечной волновой функции произвольного потенциала конечной глубины. Метод обладает тем достоинством, что при его использовании не возникает проблемы учета непрерывного спектра и поэтому выделение движения центра масс может быть выполнено с любой желаемой точностью.

Автор признателен С.П. Ивановой, В.И. Фурману, Р.А. Эрамжяну, З. Бохнацкому, В.Б. Беляеву, В. Рыбарска за интерес к работе и полезные обсуждения.

### Приложение

#### Метод численного решения уравнения Штурма-Лиувилля

Перепишем уравнение (10) в следующем виде:

Т А Б Л И Ц А I

Собственные значения  $E_M$  (последняя строка), коэффициенты разложения  $a_{NL}^{ne}$  двухнейтронной системы в потенциале Саксона-Вудса.

$NLnl$	$a_{NL}^{ne}$	$a_{NL}^{ne}$	$NLnl$	$a_{NL}^{ne}$	$NLnl$	$a_{NL}^{ne}$	$a_{NL}^{ne}$
0000	1.000	-0.001	0101	1.003	0100	1.002	-0,030
0010	-0.001	-0.802	0111	0.001	0110	-0.006	0,999
0020	0.002	-0.038	0121	0.003	0102	0.000	0.000
1000	-0.001	-0.778	1101	0.001	1100	0.002	-0.054
1010	-0.003	0.000	1111	0.000	1110	-0.002	0.009
1020	0.000	-0.006	1121	0.001	1102	0.000	0.000
2000	0.002	-0.037	2101	0.003	0300	0.000	0.000
2010	0.000	0.006	2111	0.001	0310	0.000	0.000
2020	0.000	0.000	2121	0.000	0302	0.000	0.000
Энергия							
$E_M$ Мэв	-65.830	-28.078		-35.598		-50.880	-12.610

$$\frac{d^2 G_{NL}}{dR^2} = [g(R) + a_{NL} u(R)] G_{NL}(R), \quad (A1)$$

где

$$g(R) = \frac{L(L+1)}{R^2} - \frac{2m}{\hbar^2} E_{0L}, \quad u(R) = \frac{2m}{\hbar^2} V(R).$$

Мы считаем, что  $E_{0L}$  - известная величина, нужно найти собственные значения  $a_{NL}$  и собственные функции задачи (A1) с граничными условиями  $G_{NL}(R) \rightarrow 0$  при  $R \rightarrow 0$  и  $R \rightarrow \infty$ .

Воспользуемся методом <sup>/14/</sup>, предложенным для численного решения уравнения Шредингера. Если шаг численного интегрирования выбран постоянным и равным  $h$ , то можно применить рекуррентные соотношения Нумерова <sup>/15/</sup>:

$$Z_{i+1} = 2Z_i - Z_{i-1} + h^2 f_i G_i \quad (A2)$$

где

$$f(R) = g(R) + a_{NL} u(R) \quad (A3)$$

$$Z_i = \left(1 - \frac{h^2}{12} f\right) G_i.$$

При численном решении уравнений типа (A1) обычно интегрирование ведется в два этапа при фиксированном значении  $a$  ( $a_{NL}$ ): интегрируют уравнение (A1) от начала координат в сторону больших  $R$  (получают внутреннее решение -  $G$  внут) и интегрируют уравнение (A1) при очень больших  $R$  в сторону малых  $R$  (внешнее решение -  $G$  внеш.). Из требования равенства логарифмических производных этих решений в точке сшивания  $R_m$  можно получить собственное значение  $a_{NL}$  и соответствующие собственные функции  $G_{NL}(R)$ .

Рассмотрим два решения  $G(a)$  и  $G(a+\delta a)$ , отвечающие значениям  $a$  и  $a+\delta a$ , т.е.:

$$\frac{d^2 G(a)}{dR^2} = [g(R) + a u(R)] G(a)$$

$$\frac{d^2 G(a+\delta a)}{dR^2} = [g(R) + (a+\delta a) u(R)] G(a+\delta a).$$

(A4)

Отсюда легко получить:

$$\begin{aligned} & [G(a)G'(a+\delta a) - G(a+\delta a)G'(a)]_{R=a}^{R=b} = \\ & = \delta a \int_{R=a}^{R=b} u(R) G(a)G(a+\delta a) dR, \end{aligned}$$

(A5)

где штрих означает дифференцирование по  $R$ .

Приравнявая внутреннее  $G_{\text{внут}}$  и внешнее решение  $G_{\text{внеш}}$  уравнения (A1) в точке сшивания  $R_m$  и обозначая их величину через  $G_m(a)$ , получим поправку  $\delta a$  к пробному значению  $a$ :

$$\delta a = - \frac{[G'_{\text{внут}}(a) - G'_{\text{внеш}}(a)]G_m(a)}{\int_0^{R_m} u(R)G_{\text{внут}}(a)G_{\text{внут}}(a+\delta a)dR + \int_{R_m}^{\infty} u(R)G_{\text{внеш}}(a)G_{\text{внеш}}(a+\delta a)dR}$$

(A6)

Используя (A2), (A3) и метод /14/, можно получить следующее приближенное соотношение

$$\delta a = - \frac{z_m [-z_{\text{внут}, m-1} - z_{\text{внеш}, m+1} + 2z_m + h^2 f_m G_m]}{h \int_0^{R_m} u(R)G_{\text{внут}}^2 dR + h \int_{R_m}^{\infty} u(R)G_{\text{внеш}}^2 dR} + O(h^4),$$

(A7)



где величины  $z$  и  $f$  определяются (A3),  $z_m$ ,  $f_m$  вычислены в точке сшивания  $R = R_m$ ,  $Z_{\text{внут}, m-1}$  - в точке  $R = R_m - h$ ,  $Z_{\text{внеш}, m+1}$  - в точке  $R = R_m + h$ .

Итак, если в начале расчетов задано пробное значение  $a$ , то можно по формуле (A7) найти новое значение  $a' = a + \delta a$ , которое ближе к точному собственному значению  $a_{NL}$ . Численные результаты показывают, что сходимость предложенного метода нахождения собственных чисел  $a_{NL}$  задачи Штурма-Лиувилля зависит от пробного значения  $a$ . Выбор величины начального значения  $a$  определяет, какое из собственных чисел  $a_{NL}$  ( $a_{N-1,L} ; a_{NL} ; a_{N+1,L}$ ) получится в результате вычислений, поскольку данный метод дает собственное значение  $a_{NL}$ , ближайшее к пробному значению  $a$ . Эта неопределенность ликвидируется, если пробное значение  $a$  вычислено по формуле /16/:

$$\int_{R_1}^{R_2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_{0L} - a_{NL} V(R)) - \frac{(L+1/2)^2}{R^2}} dR = \pi (N+1/2), \quad (A8)$$

где  $R_1$  и  $R_2$  - классические точки поворота.

В этом случае заранее известно, к какому собственному значению  $a_{NL}$  будет сходиться итерационный ряд. Расчеты по формулам (A7) и (A8) уже на шестой итерации дают значения собственных чисел  $a_{NL}$  с точностью до четвертого знака после запятой.

#### Литература

1. В.Г. Неудачин, Ю.Ф. Смирнов. Нуклонные ассоциации в легких ядрах. Издательство "Наука". Москва, 1969.
2. H. Bethe, M.E. Rose. Phys.Rev., 51, 283 (1937). J.P. Elliot, T.H.R. Skyrme, Proc.Roy.Soc., London, A232, 561 (1955).

- I. Unna, I. Talmi. Phys.Rev., 112, 452 (1958).  
 E. Baranger, C.W.Lee. Nucl.Phys., 22, 157 (1961).
- Ю.Ф. Смирнов, К.В. Шитикова. Изв. АН СССР, 27, 1442 (1963);  
 Yu. F. Smirnov. Nucl.Phys., 27, 177 (1961).
3. H.J. Lipkin. Phys.Rev., 110, 1395 (1958).
  4. F. Palumbo. Nucl.Phys., A99, 100 (1967).  
 W. Scheid, W. Greiner. Annals of Physics, 48, 493 (1968).
  5. B.F. Bayman, A. Kallio. Phys.Rev., 156, 1121 (1967).
  6. J.G. Zabolitzky, M. Gari, H. Kummel. Nucl.Phys., A155, 526(1970).
  7. Ф.А. Гареев, С.П. Иванова, Б.Н. Калинин. Изв. АН СССР, серия физическая XXXII , 1690 (1968).
  8. Ф.А. Гареев, С.П.Иванова, Н.Ю. Ширикова. Препринт ОИЯИ Р4-5351 (1970).
  9. B.L. Andersen, B.B. Back, J.M. Bang. Nucl.Phys., A147, 33(1970).
  10. I. Talmi. Helv.Phys.Acta., 25, 185 (1952).
  11. M. Moshinsky. Nucl.Phys., 13, 104 (1959).
  12. С.Г. Михлин. Вариационные методы в математической физике. Издательство технико-теоретической литературы. Москва (1957).
  13. P.I. Eberlein, J.Soc.Indust.Appl.Math., V10, No1, 1962.
  14. L. Lovitch, S. Rosati. Preprint Instituto di Fisica Dell'universita di Pisa, 1965/III.
  15. D.R. Hartree. The Calculation of Atomic Structures (Wiley, New York, 1967).
  16. Б.Н. Калинин, Я. Грабовский, Ф.А. Гареев. Acta Phys.Pol., XXX, 999 (1966).

Рукопись поступила в издательский отдел

8 февраля 1971 года.