сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р4-83-135

В.П.Великов, К.И.Иванов, А.Т.Маринов

ВЫЧИСЛЕНИЕ ДВУХЦЕНТРОВЫХ КУЛОНОВСКИХ ФАЗ РАССЕЯНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АСИМПТОТИЧЕСКИХ РЯДОВ ДЛЯ НЕРЕГУЛЯРНЫХ КУЛОНОВСКИХ СФЕРОИДАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ с-ТИПА

1983

В работе [1] на основе общей теории линейных однородных дифференциальных уравнений второго порядка показано, что для вычисления значений нерегулярных (в особой точке $\xi = 1$) решений $\Pi^{\pm}_m(\alpha,\lambda,c;\xi)$ радиального уравнения Шредингера двухцентровой кулоновской задачи [2]

$$\frac{d}{d\xi}\left[(\xi^2-1)\frac{d\Pi_m}{d\xi}\right]+\left[-\lambda+c^2(\xi^2-1)-\alpha\xi-\frac{m^2}{\xi^2-1}\right]\Pi_m=0, \quad (1)$$

$$c=fk\ ,\quad m=0,1,2,\dots,\quad \xi\geqslant 1,$$

можно с успехом использовать асимптотические ряды для этих решений, соответствующих нерегулярной особой точке $\xi=\infty$ уравнения (1). В формуле (1) k^2 – энергия рассеивающейся частицы, $2f$ – расстояние между кулоновскими центрами, α – постоянная, зависящая от f , от зарядов центров и от зарядов рассеивающейся частицы, а λ – собственное значение $\lambda_{ml}(c)$ задачи Штурма-Лиувилля для угловых функций [2].

Упомянутые асимптотические ряды имеют следующий вид:

$$\Pi^{\pm}_m(\alpha,\lambda,c;\xi)=$$

$$=\left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^{\frac{m}{2}}e^{\pm i\left[c\xi-\frac{\alpha}{2c}\ln(\xi+1)\right]}\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{C^{m,\pm}_{\nu}}{(\xi+1)^{\nu}}\ ,\ (c>0),\quad (2)$$

где коэффициенты $C^{m,\pm}_{\nu}$ удовлетворяют трехчленным рекуррентным соотношениям

$$C^{m,\pm}_{\nu}=A^{m,\pm}_{\nu}C^{m,\pm}_{\nu-1}+B^{m,\pm}_{\nu}C^{m,\pm}_{\nu-2}\ , \quad (3)$$

$$A_\nu^{m,\pm} = \frac{\left(\frac{\alpha}{c}+4c\right)\left(\nu-\frac{3}{2}\right)+2cm \pm i\left[\lambda+\alpha+\frac{\alpha^2}{4c^2}-(\nu-1)(\nu-2)\right]}{2c(\nu-1)},$$

$$B_\nu^{m,\pm} = \frac{-\alpha\left[\frac{2}{c}(\nu-2)+\frac{m}{c}\right] \mp i\left[\frac{\alpha^2}{2c^2}-2(\nu-2)(\nu-2+m)\right]}{2c(\nu-1)}, \qquad (4)$$

$$(\nu=2,3,\dots,\ C_1^{m,\pm}=1\ ,\ C_0^{m,\pm}=0).$$

Результаты, полученые в работе [1], дают возможность найти такое $\xi_n > 1$ $(n=1,2,\dots)$, что если для вычисления значений функций $\Pi_m^\pm$ в точках $\xi \geqslant \xi_n$ будем использовать подходящую частичную сумму $\sigma_m^{n,\pm}$ ряда (2), а для вычисления значений производных $\partial\Pi_m^\pm/\partial\xi$ – производную $\partial\sigma_m^{n,\pm}/\partial\xi$ суммы $\sigma_m^{n,\pm}$, то получаемые при этом относительные ошибки будут произвольно малыми по модулю. Таким образом, мы можем получить значения $\Pi_m^\pm$ и $\partial\Pi_m^\pm/\partial\xi$ в данной точке $\xi \geqslant \xi_n$ с произвольной точностью.

В настоящей работе вычисление значений нерегулярных решений уравнения (1) проводится в случае равенства зарядов кулоновских центров. В этом случае параметр λ в (1) надо заменять собственными значениями $\lambda_{m\ell}^{(0)}(c)$ задачи для угловых сфероидальных функций [2].

Вычисление этих собственных значений осуществляется с использованием непрерывных дробей [2], [3], [4]. Однако в отличие от [3] и [4] мы решаем трансцендентное уравнение для $\lambda_{m\ell}^{(0)}$ итерационным методом Вегстейна [4], который в некоторых отношениях оказывается более эффективным.

Значения $\Pi_m^\pm$ и $\partial\Pi_m^\pm/\partial\xi$ мы получаем вычислением частичных сумм $\sigma_m^{n,\pm}$ и $\partial\sigma_m^{n,\pm}/\partial\xi$ в точке $\xi \geqslant \xi_n$, выбираемой из оценочных формул для ξ_n при $n \sim 10$. При этом относительная ошибка получается меньше 10^{-12}. Контроль вычислений осуществляется с помощью определителя Вронского $W(\Pi^+,\Pi^-)$. Относительная ошибка для этого определителя во всех наших вычислениях порядка 10^{-13}.

Регулярное решение $\Pi_m(\alpha,\lambda_{m\ell}^{(0)},c;\xi)$, чье значение, а также значение его производной надо определить в той же точке ξ, мы нормируем условием

$$\lim_{\xi\to 1}(\xi^2-1)^{-m/2}\,\Pi_m(\alpha,\lambda_{m\ell}^{(0)},c;\xi)=1. \qquad (5)$$

Оно имеет асимптотику

$$\Pi_m(\alpha,\lambda_{m\ell}^{(0)},c;\xi)=$$

$$=\frac{K_{m\ell}(c)}{c\xi}\left\{\sin\left(c\xi-\frac{\alpha}{2c}\ln 2c\xi+\Delta_{m\ell}(c)-\frac{\pi\ell}{2}\right)+o(1)\right\} \qquad (6)$$

$$(\xi\to\infty\ ,\ c>0),$$

где нормировочный множитель $K_{m\ell}(c)$ и кулоновская двухцентровая фаза $\Delta_{m\ell}(c)$ вычисляются по формулам

$$K_{m\ell}(c)=(\xi^2-1)\left|W(\Pi_m,\Pi_m^\pm)\right|, \qquad (7)$$

$$\Delta_{m\ell}(c)=\frac{\alpha}{2c}\ln 2c+\frac{\pi\ell}{2}+\operatorname{arctg}\frac{\operatorname{Im}W(\Pi_m,\Pi_m^-)}{\operatorname{Re}W(\Pi_m,\Pi_m^-)}, \qquad (8)$$

$$\ell=0,1,2,\dots,\quad m=0,1,\dots,\ell,\quad c>0.$$

Все определители Вронского в (7) и (8) вычисляются в точке ξ.

Значения регулярного решения и его производной в точке ξ получаются интегрированием дифференциального уравнения (1) с начальными условиями в точке, близкой к точке $\xi=1$. Эти начальные условия определяются с помощью тейлоровского разложения регулярного решения [I]. Интегрирование уравнения (I) производится переменным шагом по методу предсказаний-уточнений (метод Адамса [5]), который обеспечивает желанную точность (десять верных значащих цифр).

Некоторые результаты вычислений представлены в приложенных таблицах.

Авторам приятно выразить свою глубокую признательность Л.И. Пономареву и Х. Семерджиеву за полезные обсуждения и плодотворные советы.

ТАБЛИЦЫ

двухцентровых кулоновских фаз рассеяния и нормировочных множителей для $\alpha = -4$

m	ℓ	c	$\Delta_{m\ell}(c)$	$K_{m\ell}(c)$
0	0	0,025	8,56205 26033 (-1)	1,26997 96535 (-1)
0	1		9,26911 18385 (-1)	1,35733 04348 (-1)
1	1		3,07990 58715 (0)	1,69469 35635 (-1)
0	2		2,29808 67925 (0)	4,65873 32223 (-1)
1	2		2,08447 30883 (0)	4,98957 16127 (-1)
2	2		1,80844 63391 (0)	6,80229 19390 (-1)
0	3		3,70084 19979 (0)	8,30682 19979 (0)
1	3		3,67719 61216 (0)	5,12169 07303 (0)
2	3		3,61418 10660 (0)	5,01590 97274 (0)
3	3		3,52400 17396 (0)	6,03945 96281 (0)
0	4		2,13369 54386 (0)	2,67609 60568 (2)
1	4		2,12797 16112 (0)	1,20003 99865 (2)
2	4		2,11110 30022 (0)	8,98997 63075 (1)
3	4		2,08390 12463 (0)	8,65839 82757 (1)
4	4		2,04749 98258 (0)	9,71076 44856 (1)
0	5		3,74985 00917 (0)	1,33756 38239 (4)
1	5		3,74785 33107 (0)	4,79506 17328 (3)
2	5		3,74189 63705 (0)	2,95176 79929 (3)
3	5		3,73205 77169 (0)	2,38740 12402 (3)
4	5		3,71846 50515 (0)	2,28971 70370 (3)
5	5		3,70128 54935 (0)	2,47071 50229 (3)
0	0	0,1	2,17022 72943 (0)	2,54075 43350 (-1)
0	1		2,27634 47857 (0)	2,71548 93211 (-1)
1	1		1,29010 75397 (0)	3,38474 17842 (-1)
0	2		5,83197 93145 (-1)	9,27223 74160 (-1)
1	2		3,68967 46732 (-1)	9,92892 31580 (-1)
2	2		9,34078 46835 (-2)	1,35184 32095 (0)
0	3		2,09721 94657 (0)	1,63518 12104 (1)
1	3		2,07349 80577 (0)	1,00836 17073 (1)
2	3		2,01040 46397 (0)	9,87257 89064 (0)
3	3		1,92029 19136 (0)	1,18788 31008 (1)
0	4		6,77474 51366 (-1)	5,17147 22159 (2)
1	4		6,71737 64126 (-1)	2,31924 11751 (2)
2	4		6,54836 24458 (-1)	1,73731 62503 (2)
3	4		6,27601 94299 (-1)	1,67283 44884 (2)
4	4		5,91192 49004 (-1)	1,87536 51824 (2)
0	5		2,47617 94321 (0)	2,51237 83804 (4)
1	5		2,47417 90935 (0)	9,00719 41528 (3)
2	5		2,46820 64820 (0)	5,54458 59939 (3)
3	5		2,45834 47313 (0)	4,48402 81083 (3)
4	5		2,44472 59273 (0)	4,29974 92418 (3)
5	5		2,42752 27026 (0)	4,63834 70990 (3)

m	ℓ	c	$\Delta_{m\ell}(c)$	$K_{m\ell}(c)$
0	0	0,2	3,93045 96962 (0)	3,59316 82973 (-1)
0	1		9,38381 40126 (-1)	3,84028 27503 (-1)
1	1		-4,08083 69315 (-2)	4,76184 61374 (-1)
0	2		2,49191 45508 (0)	1,29122 70060 (0)
1	2		2,27561 68903 (0)	1,38191 23067 (0)
2	2		2,00121 92018 (0)	1,87386 56367 (0)
0	3		1,00628 40287 (0)	2,20142 34215 (1)
1	3		9,82285 76226 (-1)	1,35827 12314 (1)
2	3		9,18829 29729 (-1)	1,32870 56999 (1)
3	3		8,28738 44497 (-1)	1,59525 68622 (1)
0	4		2,91110 76253 (0)	6,59026 04232 (2)
1	4		2,90530 68297 (0)	2,95637 48414 (2)
2	4		2,88823 90665 (0)	2,21416 95403 (2)
3	4		2,86079 87740 (0)	2,13045 69450 (2)
4	4		2,82422 08177 (0)	2,38535 90651 (2)
0	5		1,78685 23192 (0)	2,95122 30511 (4)
1	5		1,78482 18689 (0)	1,05825 27572 (4)
2	5		1,77876 21126 (0)	6,51407 45833 (3)
3	5		1,76876 53344 (0)	5,26658 28211 (3)
4	5		1,75497 76739 (0)	5,04739 84689 (3)
5	5		1,73758 92596 (0)	5,44043 66462 (3)
0	0	0,9	-1,41295 54497 (0)	7,62133 55032 (-1)
0	1		-1,06575 41294 (0)	8,13274 96690 (-1)
1	1		1,22487 70694 (0)	8,97258 68176 (-1)
0	2		1,18120 29133 (0)	2,03143 74736 (0)
1	2		9,11398 68475 (-1)	2,14399 31482 (0)
2	2		6,45893 07652 (-1)	2,68352 21697 (0)
0	3		3,19907 00564 (-1)	2,04773 16275 (1)
1	3		2,86427 06521 (-1)	1,28477 63187 (1)
2	3		2,09011 55885 (-1)	1,24041 60882 (1)
3	3		1,10884 32471 (-1)	1,43362 34084 (1)
0	4		2,90078 90380 (0)	3,18445 03199 (2)
1	4		2,89276 41219 (0)	1,44171 97015 (2)
2	4		2,86983 42458 (0)	1,07993 29746 (2)
3	4		2,83464 44838 (0)	1,02880 17908 (2)
4	4		2,79025 68404 (0)	1,12903 94731 (2)
0	5		-6,79173 60808 (-1)	6,45461 24870 (3)
1	5		-6,82123 61029 (-1)	2,32823 65713 (3)
2	5		-6,90844 79166 (-1)	1,43597 22033 (3)
3	5		-7,04975 91836 (-1)	1,15820 62264 (3)
4	5		-7,23984 84382 (-1)	1,10224 06617 (3)
5	5		-7,47241 74918 (-1)	1,17416 57653 (3)

m	ℓ	c	$\Delta_{m\ell}(c)$	$K_{m\ell}(c)$
0	0	1,0	-1,24134 36953 (0)	8,03307 18051 (-1)
0	1		-8,78809 21549 (-1)	8,56580 99372 (-1)
1	1		1,43589 42263 (0)	9,21979 50205 (-1)
0	2		1,45286 52278 (0)	2,02786 66377 (0)
1	2		1,17119 51673 (0)	2,13165 77610 (0)
2	2		9,06710 34764 (-1)	2,62697 52820 (0)
0	3		6,37429 06444 (-1)	1,88146 12165 (1)
1	3		6,01453 03213 (-1)	1,18569 51216 (1)
2	3		5,20849 21234 (-1)	1,14209 20418 (1)
3	3		4,20965 94962 (-1)	1,31055 77785 (1)
0	4		3,25973 58408 (0)	2,69082 10175 (2)
1	4		3,25119 34401 (0)	1,22121 64725 (2)
2	4		3,22696 40978 (0)	9,15175 44781 (1)
3	4		3,19016 60642 (0)	8,70350 96203 (1)
4	4		3,14427 49226 (0)	9,51591 54008 (1)
0	5		-2,83297 49960 (-1)	4,98504 43616 (3)
1	5		-2,86438 83949 (-1)	1,80092 38520 (3)
2	5		-2,95704 97446 (-1)	1,11151 52207 (3)
3	5		-3,10657 62682 (-1)	8,96289 15525 (2)
4	5		-3,30661 71926 (-1)	8,51932 02141 (2)
5	5		-3,54980 85391 (-1)	9,05525 66913 (2)
0	0	4,0	-6,69242 01506 (-1)	1,59650 81630 (0)
0	1		-4,85777 82893 (-1)	1,61259 40706 (0)
1	1		-6,97464 32104 (-1)	8,07511 88280 (-1)
0	2		2,86550 06276 (0)	1,74971 87034 (0)
1	2		2,53765 51594 (0)	1,10073 74631 (0)
2	2		2,38738 14823 (0)	8,21106 70362 (-1)
0	3		-3,24016 38047 (-1)	2,64772 24827 (0)
1	3		-5,81155 36649 (-1)	1,85285 27572 (0)
2	3		-7,24367 64108 (-1)	1,46469 75152 (0)
3	3		-8,20608 22905 (-1)	1,26011 59978 (0)
0	4		2,55804 18467 (0)	8,02059 56444 (0)
1	4		2,47877 22885 (0)	4,46195 17022 (0)
2	4		2,39075 75924 (0)	3,38699 52674 (0)
3	4		2,31592 42314 (0)	2,82877 42181 (0)
4	4		2,25391 66257 (0)	2,58982 95999 (0)
0	5		-7,60220 59286 (-1)	3,79346 96163 (1)
1	5		-7,80016 24433 (-1)	1,57366 53789 (1)
2	5		-8,20328 80744 (-1)	1,02108 78244 (1)
3	5		-8,65988 53400 (-1)	8,03960 47762 (0)
4	5		-9,10491 92314 (-1)	7,06251 28913 (0)
5	5		-9,51693 80675 (-1)	6,66973 03144 (0)

m	ℓ	c	$\Delta_{m\ell}(c)$	$K_{m\ell}(c)$
0	0	4,5	-6,46309 24494 (-1)	1,69293 29757 (0)
0	1		-5,03125 93530 (-1)	1,70239 49160 (0)
1	1		-6,65077 47980 (-1)	7,68744 58050 (-1)
0	2		2,83434 45211 (0)	1,79400 11222 (0)
1	2		2,56281 25318 (0)	1,01127 28899 (0)
2	2		2,43499 14192 (0)	6,99934 36926 (-1)
0	3		-2,58237 66903 (-1)	2,37319 55842 (0)
1	3		-5,33960 28500 (-1)	1,57239 88739 (0)
2	3		-6,69869 63094 (-1)	1,17470 38162 (0)
3	3		-7,57750 38912 (-1)	9,59174 17023 (-1)
0	4		2,67369 15399 (0)	5,71561 21572 (0)
1	4		2,56196 56644 (0)	3,30731 70799 (0)
2	4		2,46492 97417 (0)	2,42775 86909 (0)
3	4		2,38980 63413 (0)	1,99114 75337 (0)
4	4		2,33038 00864 (0)	1,75698 05724 (0)
0	5		-6,49254 76615 (-1)	2,31824 02994 (1)
1	5		-6,77758 04668 (-1)	1,00362 70006 (1)
2	5		-7,26580 39314 (-1)	6,55761 44403 (0)
3	5		-7,76706 67749 (-1)	5,09907 14850 (0)
4	5		-8,22639 74861 (-1)	4,38137 53167 (0)
5	5		-8,63485 60919 (-1)	4,02827 38196 (0)

ЛИТЕРАТУРА

1. Иванов К. И., Маринов А. Т., Сообщение ОИЯИ, Р4-81-455,1981.
2. Комаров И. В., Пономарев Л. И., Славянов С. Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
3. Ерашевская С. П. и др. Таблицы сфероидальных волновых функций и их первых производных. "Наука и техника",Минск, 1973.
4. Ланс Дж. Н. Численные методы для быстродействующих вычислительных машин. ИЛ, М., 1962.
5. Хемминг Р. В. Численные методы для научных работников и инженеров. "Мир", М., 1977.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 марта 1983 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

Д3-11787	Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
Д13-11807	Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.	6 р. 00 к.
	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
Д1,2-12036	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978	5 р. 00 к.
Д1,2-12450	Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.	3 р. 00 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
Д11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
Д4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
Д4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
Д2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
Д10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
Д1,2-81-728	Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 60 к.
Д17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
Д1,2-82-27	Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 20 к.
Р18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
Д2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
Д9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
Д3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Великов В.П., Иванов К.И., Маринов А.Т. Р4-83-135

Вычисление двухцентровых кулоновских фаз рассеяния с использованием асимптотических рядов для нерегулярных кулоновских сфероидальных функций с-типа

Предлагается новый метод вычисления двухцентровых кулоновских фаз рассеяния и нормировочных множителей регулярных двухцентровых кулоновских функций, нормированных соответствующим образом в начале координат. В алгоритме вычисления используются асимптотические ряды для нерегулярных двухцентровых кулоновских волновых функций с-типа. На основе этого алгоритма написана программа на фортране и получены численные результаты для фаз и нормировочных множителей с десятью верными значащими цифрами. Сравнение предлагаемого метода с другими методами вычисления двухцентровых кулоновских фаз рассеяния показало, что при одной и той же точности результата он в несколько раз быстрее, а при одинаковом времени счета его точность выше на 4-5 порядков.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Velikov V.P., Ivanov K.I., Marinov A.T. P4-83-135

Calculation of Two-Center Coulomb Scattering Phases with the Use of Asymptotic Expansions for Irregular Coulomb Spheroidal c-Type Functions

A new method is proposed for calculating the Coulomb phases for scattering off two centers and of the normalization factors of the regular two-center Coulomb functions which satisfy a properly set condition at the origin. The numerical algorithm utilizes asymptotic expansions for the irregular c-type two-center Coulomb wave functions. This algorithm has been realized in a FORTRAN program, which enables one to calculate phases and the normalization factors with the accuracy up to ten decimal places. Comparison of our method with others for calculating the Coulomb phases for scattering off two centers has shown that the same accuracy is reached by our method at a much faster rate and, likewise, for the same amount of computer time the accuracy is better in 4-5 places.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой.