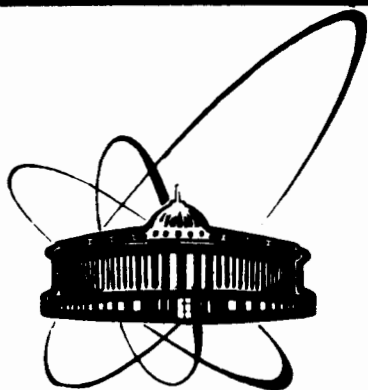


88-640.



ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

P4-88-640

А.Г.Абрашкевич\*, Д.Г.Абрашкевич\*, С.И.Виницкий,  
М.С.Касчиев, В.Ю.Пойда\*, И.В.Пузынин

СХОДИМОСТЬ  
ГИПЕРСФЕРИЧЕСКОГО АДИАБАТИЧЕСКОГО  
РАЗЛОЖЕНИЯ  
ДЛЯ ГЕЛИЕПОДОБНЫХ СИСТЕМ

Направлено на Международный рабочий семинар  
"Микроскопические методы в теории систем  
нескольких частиц", Калинин, август 1988 г.  
и в "Journal of Physics B"

---

\* Ужгородский государственный университет

1988

В последнее время большое внимание уделяется изучению процессов возбуждения и ионизации в двухэлектронных атомных системах<sup>/1-3/</sup>. динамическое поведение этих систем адекватно описывается в рамках гиперсферического адиабатического (HSA) подхода<sup>/4/</sup>, в котором естественным образом учитывается коррелированное движение электронов. Разделение движения электронов в пространстве  $\mathbb{R}^6$  на быстрое движение по поверхности "сферы"  $S^5$  и медленное движение вдоль гиперрадиуса  $R$  реализуется введением HSA-разложения для полной волновой функции

$$\Psi(R, \Omega) = (R \sin \alpha \cos \alpha)^{-5/2} \sum_{\mu} F_{\mu}(R) \Phi_{\mu}(R; \Omega), \quad (1)$$

где

$$R = \sqrt{z_1^2 + z_2^2}, \quad \Omega = \{\alpha, \hat{z}_1, \hat{z}_2\}, \quad \alpha = \arctg(z_2/z_1), \quad \hat{z}_i = \{\theta_i, \varphi_i\}, \quad i=1,2.$$

здесь  $\Phi_{\mu}(R; \Omega)$  являются решениями задачи:

$$\hat{h}(R) \Phi_{\mu}(R; \Omega) = R^2 U_{\mu}(R) \Phi_{\mu}(R; \Omega) \quad (2)$$

на сфере  $S^5 \equiv \Omega$ , нормированных условием:

$$\int d\Omega \Phi_{\mu}^*(R; \Omega) \Phi_{\nu}(R; \Omega) = \delta_{\mu\nu}, \quad (3)$$

а  $U_{\mu}(R)$  есть собственные значения (термы), зависящие от  $R$  как от параметра. Подстановка разложения (1) в уравнение Шредингера для двухэлектронной системы и усреднение по азимутным функциям  $\Phi_{\mu}$  приводит к системе  $N_R$  связанных обыкновенных дифференциальных уравнений для радиальных волновых функций  $\vec{F}(R) = \{F_{\mu}(R)\}_{\mu=1}^{N_R}$

$$\left[ -\hat{I} \frac{d^2}{dR^2} + \hat{V}(R) - 2E \right] \vec{F}(R) + \frac{d}{dR} [\hat{Q}(R) \vec{F}(R)] + \hat{Q}(R) \frac{d\vec{F}(R)}{dR} = 0, \quad (4)$$

$$\vec{F}(0) = \vec{F}(R_{max}) = 0, \quad R \in [0, R_{max}]. \quad (5)$$

Здесь  $\hat{I}, \hat{V}, \hat{Q}$  - квадратные матрицы, которые определяются соотношениями:  $I_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}, \mu, \nu = 1, 2, \dots, N_R,$

$$V_{\mu\nu}(R) = -\frac{1}{4R^2} \delta_{\mu\nu} + U_{\mu}(R) \delta_{\mu\nu} + \left\langle \frac{d\Phi_{\mu}(R; \Omega)}{dR} \middle| \frac{d\Phi_{\nu}(R; \Omega)}{dR} \right\rangle, \quad (6)$$

$$Q_{\mu\nu}(R) = -Q_{\nu\mu}(R) = -\left\langle \Phi_{\mu}(R; \Omega) \middle| \frac{d\Phi_{\nu}(R; \Omega)}{dR} \right\rangle.$$

С математической точки зрения данный подход есть метод приведения к обыкновенным дифференциальным уравнениям Л.В. Канторовича<sup>5/</sup>.

До настоящего времени численные расчеты в рамках HSA-подхода проводились преимущественно в адиабатическом приближении, которое соответствует сохранению одного члена в разложении (1). При этом решается одно радиальное уравнение из системы (4) при фиксированном значении  $\mu$ . Попытки выйти за рамки адиабатического приближения для исследования роли неадиабатических эффектов были предприняты в работах /6-8/, однако в целом вопрос о скорости сходимости адиабатического разложения (1) остался открытым. Цель данной работы состоит в численном исследовании скорости сходимости HSA-разложения на примере расчета основного и нескольких дважды возбужденных состояний  $H^-$ . Для этого необходимо вычислить термы  $U_{\mu}(R)$  и собственные функции задачи (2), эффективные потенциалы  $V_{\mu\nu}(R)$  и  $Q_{\mu\nu}(R)$  и, наконец, решить задачу (4)-(5). При этом требуется изучить зависимость значений энергии  $E$  от числа уравнений  $N_R$  в системе (4).

Разложим, следуя<sup>14/</sup>, базисные функции  $\Phi_{\mu}(R; \Omega)$  по бисферическим гармоникам  $g_{L_1 L_2 L M}(\hat{r}_1, \hat{r}_2)$ . Здесь  $L$  и  $M$  - полный орбитальный момент и его проекция на ось  $Z$  л.с.к., а  $L_1$  и  $L_2$  - орбитальные моменты электронов. В результате получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений для коэффициентов этого разложения  $g_{L_1 L_2}^{(\mu)}(R; d)$

$$\left[ \frac{d^2}{dd^2} - \frac{L_1(L_1+1)}{\cos^2 d} - \frac{L_2(L_2+1)}{\sin^2 d} + R^2 U_{\mu}(R) \right] g_{L_1 L_2}^{(\mu)}(R; d) + R \sum_{L_1' L_2'} C_{L_1 L_2, L_1' L_2'}(d) g_{L_1' L_2'}^{(\mu)}(R; d), \quad (7)$$

где коэффициенты  $C_{L_1 L_2, L_1' L_2'}(d)$  определены в<sup>12-4/</sup>. В точке  $d = \pi/4$  задаются граничные условия, позволяющие учесть свойства антисимметрии функции  $g_{L_1 L_2}^{(\mu)}(R; d)$ <sup>14/</sup>

$$g_{L_1 L_2}^{(\mu)}(R; d) \Big|_{d=\pi/4} = (-1)^{L_1+L_2+L+S} g_{L_1 L_2}^{(\mu)}(R; d) \Big|_{d=\pi/4}, \quad (8)$$

$$\frac{dg_{L_1 L_2}^{(\mu)}(R; d)}{dd} \Big|_{d=\pi/4} = (-1)^{L_1+L_2+L+S+1} \frac{dg_{L_1 L_2}^{(\mu)}(R; d)}{dd} \Big|_{d=\pi/4}.$$

Для решения системы связанных дифференциальных уравнений (7) мы использовали метод конечных разностей. Соответствующая задача Штурма-Лиувилля (7)-(8) аппроксимировалась с помощью трехточечных конечно-

разностных формул второго порядка точности относительно шага сетки  $h_d$ . Для решения возникающей при этом обобщенной алгебраической задачи на собственные значения был использован метод итерации подпространств<sup>19/</sup>.

Точность вычисления термов  $U_{\mu}(R)$  и функций  $g_{L_1 L_2}^{(\mu)}(R; d)$  зависит от числа уравнений  $N_d$  системы (7), числа узлов  $n_d$  конечно-разностной сетки по  $d$  и от значения гиперрадиуса  $R$ . Исследование этой зависимости позволяет установить значения  $N_d$  и  $n_d$ , необходимые для достижения требуемой точности расчета  $U_{\mu}$  и  $g_{L_1 L_2}^{(\mu)}$  (в данной работе она равна  $10^{-4}$  а.е.). Фактически это есть исследование угловых и радиальных корреляций. В таблицах 1 и 2 показана зависимость первых двух термов  $U_{\mu}(R)$ ,  $\mu=1, 2$  от числа уравнений  $N_d$  и числа узлов конечно-разностной сетки  $n_d$  для двух значений гиперрадиуса  $R=1, 1.5$  (при фиксированных  $n_d$  и  $N_d$  соответственно). Легко видеть, что требуемая точность ( $10^{-4}$  а.е.) может быть достигнута при  $N_d=8-9$  уравнений и  $n_d=400-600$  узлов.

Применяемая в настоящем расчете конечно-разностная сетка содержала 500 узлов при числе уравнений в системе (7)  $N_d=8$ . В каждой точке по  $R$  одновременно вычислялись первые 6 термов  $U_{\mu}(R)$  и соответствующих функций  $g_{L_1 L_2}^{(\mu)}(R; d)$  задачи (7)-(8). Расчеты проводились в следующих точках по гиперрадиусу  $R$ : 0.1(0.1)2(0.2)20(0.25)30(0.5)40(1)50(2)60 (в скобках указан шаг). В таблице 3 приведены для сравнения численные и асимптотические значения термов  $U_{\mu}(R)$ , демонстрирующие точность вычисления термов при больших  $R$ . Для вычисления производных  $dg_{L_1 L_2}^{(\mu)}(R; d)/dR$  мы использовали конечно-разностные формулы четвертого порядка точности. Потенциалы  $V_{\mu\nu}(R)$  и  $Q_{\mu\nu}(R)$  сглаживались с помощью кубической сплайн-интерполяции. Задача Штурма-Лиувилля (4)-(5) решалась с помощью метода конечных элементов. Были использованы изопараметрические лагранжевы элементы четвертого порядка, обеспечивающие точность  $O(h_R^8)$  относительно собственных значений. (Здесь  $h_R$  - длина элемента). В таблице 4 показана зависимость энергии основного состояния  $H^-$  от числа радиальных уравнений  $N_R$  и числа элементов  $n_R$ . Полученное нами значение энергии основного состояния  $H^-$   $E_0 = -0,527746 \pm 0,00001$  а.е. Это значение находится в прекрасном согласии с прецизионным вариационным расчетом Пекериса  $E_0^{var} = -0,527751$  а.е.<sup>10/</sup> Укажем также на некоторые другие известные результаты:  $E_0^{CI} = -0,52751$  а.е. - метод наложения конфигураций<sup>11/</sup>,  $E_0^{MCHF} = -0,52751$  а.е. - многоконфигурационный метод Хартри-Фока<sup>12/</sup>. В табл.5 представлены результаты вычисления энергии первых трех двукратно возбужденных состояний (резонансов Фешбаха) в зависимости от числа радиальных уравнений, и дано сравнение с экспериментом<sup>14/</sup>, а также с другими расчетами<sup>13/</sup>.

Полученные результаты указывают на высокую скорость сходимости HSA-разложения для гелиеподобных систем. Это обстоятельство может служить основой для широкого использования многоканального варианта HSA-подхода, наряду с другими известными методами, в расчетах спектров двухэлектронных атомных систем.

Таблица 1. Зависимость  $U_{\mu}(R)$ ,  $\mu=1,2$  от числа уравнений  $N_{\alpha}$  системы (7) при фиксированном числе узлов сетки  $n_{\alpha}$  ( $=100$ ) и  $R=1,15$

$N_{\alpha}$	$U_1(R=1)$	$U_2(R=1)$	$U_1(R=15)$	$U_2(R=15)$
1	-0,544729	28,55293	-0,998789	-0,267283
2	-0,609005	12,81948	-0,998885	-0,267283
3	-0,615506	12,73070	-0,998886	-0,294150
4	-0,617113	12,71781	-0,998886	-0,294153
5	-0,617688	12,71392	-0,998886	-0,294153
6	-0,617943	12,71233	-0,998886	-0,294153
7	-0,618073	12,71156	-0,998886	-0,294153
8	-0,618145	12,71113	-0,998886	-0,294153
9	-0,618189	12,71088	-0,998886	-0,294153
10	-0,618217	12,71073	-0,998886	-0,294153

Таблица 2. Зависимость  $U_{\mu}(R)$ ,  $\mu=1,2$  от числа узлов конечноразностной сетки  $n_{\alpha}$  при фиксированном числе уравнений  $N_{\alpha}$  ( $=3$ ) и  $R=1,15$ .

$n_{\alpha}$	$U_1(R=1)$	$U_2(R=1)$	$U_1(R=15)$	$U_2(R=15)$
100	-0,615506	12,73070	-0,998886	-0,294150
200	-0,615570	12,73094	-1,001461	-0,294229
300	-0,615582	12,73098	-1,001941	-0,294244
400	-0,615586	12,73099	-1,002109	-0,294249
500	-0,615588	12,73100	-1,002187	-0,294252
600	-0,615589	12,73101	-1,002229	-0,294253
700	-0,615589	12,73101	-1,002255	-0,294254

Таблица 3. Сравнение вычисленных значений термов  $U_{\mu}(R)$  с асимптотическими  $U_{\mu}^{as}(R) = -z^2/n^2 + U_{\mu}^{(2)}R^{-2}$  при больших  $R$ . Здесь  $U_{\mu}^{(2)}$  есть собственные значения дипольного интеграла движения<sup>[4]</sup>.

$n$	$U_{\mu}(R=40)$	$U_{\mu}^{as}(R=40)$	$U_{\mu}(R=60)$	$U_{\mu}^{as}(R=60)$	$U_{\mu}^{(2)}$
1	-0,9990	-1,0003	-0,9973	-1,0001	-0,5
2	-0,2541	-0,2542	-0,2518	-0,2519	-6,685
3	-0,2462	-0,2465	-0,2483	-0,2484	5,685
4	-0,1240	-0,1236	-0,1165	-0,1166	-19,925
5	-0,1123	-0,1103	-0,1112	-0,1107	1,338
6	-0,0976	-0,1004	-0,1055	-0,1064	17,087

Таблица 4. Зависимость энергии основного состояния  $H^-$  (в а.е.) от числа радиальных уравнений  $N_R$  и числа элементов  $n_R$ .  $R_{max}=24$ .  $\langle r_{12} \rangle = 4.412$  (при  $R_{max}=80$ ),  $\langle r_{12} \rangle^{var} = 4.413/10$

$N_R$	$n_R=60$	$n_R=120$	$n_R=240$
1	-0,526055	-0,526044	-0,526043
2	-0,527177	-0,527166	-0,527165
3	-0,527728	-0,527716	-0,527714
4	-0,527735	-0,527724	-0,527723
5	-0,527745	-0,527734	-0,527733
6	-0,527757	-0,527746	-0,527746

Таблица 5. Зависимость энергии  $E_i^{(n=2)}$ ,  $i=1,2,3$  (в а.е.) первых трех дважды возбужденных  $1S^e$  состояний ниже второго порога от числа уравнений  $N_R$ .  $R_{max}=120$ ,  $n_R=200^x$

$N_R$	$E_1^{(2)}$	$E_2^{(2)}$	$E_3^{(2)}$
1	-0,147781	-0,125865	-0,124829
2	-0,146274	-0,125763	-0,124849
3	-0,147377	-0,125825	-0,124864
4	-0,147859	-0,125966	-0,124904
5	-0,147930	-0,125969	-0,124915
6	-0,147943	-0,125992	-0,124920

x) Для сравнения приведем результаты вычислений этих состояний TDM-методом<sup>[13]</sup>:  $E_1^{(2)} = -0,147896$  а.е.,  $E_2^{(2)} = -0,125973$  а.е.,  $E_3^{(2)} = -0,125012$  а.е. Экспериментальное значение  $E_1^{(2)} = 9,56$  эВ<sup>[14]</sup>, данный расчет:  $E_1^{(2)} = 9,57$  эВ.

Литература

1. Fano U., Rau A.R.P. Atomic Collisions and Spectra. J.Wiley, New York, 1985.
2. Fano U. Rep. Progr. Phys., 46 (1983) 97.
3. Lin C.D. Adv. Atom. Mol. Phys., 22 (1986) 77.
4. Macek J. J. Phys. B, 1 (1968) 831.
5. Канторович И.В., Крылов В.И. Приближенные методы высшего анализа. ГИИТЛ, М., 1952.
6. Greene C.H. Phys. Rev., A23 (1981) 661.
7. Hornos J.E. et al. Phys. Rev., A33 (1986) 2212.
8. Watanabe S. Phys. Rev., A25 (1982) 2074 .
9. Bathe K.-J. Finite element procedures in engineering analysis. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, 1982.
10. Pekeris C.L. Phys. Rev., 126 (1962) 1470.
11. Weiss A.W. Phys. Rev., 122 (1961) 1826.
12. Fischer C.F. Hartree-Fock method for atoms. Acad. Press, New York, 1977.
13. Conneely M.J., Lipsky L. J. Phys. B, 11 (1978) 4135.
14. Sanche L., Burrow P.D. Phys. Rev. Lett., 29 (1972) 1939.

Рукопись поступила в издательский отдел  
25 августа 1988 года.

Абрашкевич А.Г. и др.

P4-88-640

Сходимость гиперсферического адиабатического  
разложения для гелиеподобных систем

Численно исследована сходимость гиперсферического адиабатического разложения. Возникающие при разделении переменных спектральные задачи решаются методом конечных разностей и конечных элементов. В шестиканальном приближении вычислены энергии основного и нескольких дважды возбужденных состояний отрицательного иона водорода с точностью  $\sim 10^{-4}$  а.е. Полученные результаты указывают на высокую скорость сходимости гиперсферического адиабатического разложения.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники  
и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод авторов

Abrashkevich A.G. et al.

P4-88-640

Convergence of Hyperspherical Adiabatic  
Expansion for Helium-Like Systems

The convergence of hyperspherical adiabatic expansion has been studied numerically. The spectral problems arising after separation of variables are solved by the finite-difference and finite element methods. The energies of the ground and some doubly excited states of a hydrogen ion are calculated in the six-channel approximation within the  $10^{-4}$  a.u. accuracy. Obtained results demonstrate a rapid convergence of the hyperspherical adiabatic expansion.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988