



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р4-88-91

А.Г.Абрашкевич*, М.И.Гайсак*, В.И.Лендьел*,
В.Ю.Пойда*, И.В.Пузынин

МНОГОКАНАЛЬНЫЙ РАСЧЕТ ЭНЕРГИЙ
ОСНОВНЫХ СОСТОЯНИЙ
ГЕЛИЕПОДОБНЫХ СИСТЕМ
В РАМКАХ МЕТОДА
ГИПЕРСФЕРИЧЕСКИХ КООРДИНАТ

Направлено в "Physics Letters A"

* Ужгородский государственный университет

1988

В работе Мачека^{/1/} метод гиперсферических координат был впервые успешно применен к расчету и классификации автоионизационных состояний He. В дальнейшем метод развивался в работах^{/2-4/} (см. обзор Фано^{/5/}). В недавней работе^{/6/} основное внимание было уделено изучению и аккуратному вычислению потенциальных кривых и канальных волновых функций с тщательным исследованием ошибок, возникающих из-за ограничения конечным числом членов в использованных авторами разложениях. В этой работе также исследовались матричные элементы радиальной связи, и в приближении двух каналов выполнен расчет основного состояния атома He. Вопрос о необходимости выхода за рамки адиабатического приближения для существенного повышения точности расчетов спектра энергий двухэлектронных систем неоднократно поднимался в литературе. Ограничение двумя радиальными уравнениями не дает ответ на поставленный вопрос. Поэтому представляет несомненный интерес выполнить исследование влияния межканальной связи на уровни энергии. Настоящая работа посвящена анализу эффектов неадиабатической связи для основных состояний гелиеподобных систем H^- , He, Li^+ , Be^{++} .

Следуя работам^{/1-6/}, мы используем редукцию исходного шестимерного уравнения Шредингера в гиперсферических координатах к бесконечной системе обыкновенных дифференциальных уравнений по радиальной переменной R

$$\left[\left(\frac{d^2}{dR^2} - \frac{U_{\mu\nu}(R)}{R^2} + 2E \right) \delta_{\mu\nu} + \langle \Phi_{\mu} | \frac{d}{dR} \Phi_{\nu} \rangle \frac{d}{dR} + \langle \Phi_{\mu} | \frac{d^2}{dR^2} \Phi_{\nu} \rangle \right] F_{\nu}(R) = 0, \quad (1)$$

с граничными условиями

$$F_{\mu}(0) = F_{\mu}(\infty) = 0, \quad \mu, \nu = 0, 1, \dots \quad (2)$$

Потенциальные кривые $U_{\mu\nu}(R)$ и канальные функции $\Phi_{\mu}(R; \Omega)$ мы находим, решая алгебраическую задачу на собственные значения

$$\left[A_{n\ell_1\ell_2}^{n'\ell_1'\ell_2'}(R) - U_{\mu\nu}(R) \right] g_{n\ell_1\ell_2}^{\mu}(R) = 0, \quad (3)$$

где

$$A_{n\ell_1\ell_2}^{n'\ell_1'\ell_2'}(R) = (\ell_1 + \ell_2 + 2n + 2)^2 \delta_{n\ell_1\ell_2} \delta_{\ell_1\ell_1'} \delta_{\ell_2\ell_2'} - R \langle n\ell_1\ell_2 | \hat{C} | n'\ell_1'\ell_2' \rangle, \quad (4)$$

$$\Phi_{\mu}(R; \Omega) = \sum_{n\ell_1\ell_2} g_{n\ell_1\ell_2}^{\mu}(R) |n\ell_1\ell_2\rangle. \quad (5)$$

Матричные элементы $\langle n\ell_1\ell_2 | \hat{C} | n'\ell_1'\ell_2' \rangle$ от оператора кулоновского взаимодействия \hat{C} в пространстве собственных функций $|n\ell_1\ell_2\rangle$ оператора обобщенного углового момента в шестимерном пространстве мы записываем в виде конечных знакопеременных сумм. При вычислении таких сумм с ростом квантового числа n быстро накапливаются ошибки. Как отмечено в работе^{/7/}, на 64-разрядных ЭВМ практически возможно вычисление матричных элементов лишь до $K_{max} = 16$ ($K = \ell_1 + \ell_2 + 2n$). Однако значение $K_{max} = 16$ не обеспечивает достаточной точности, необходимой для анализа межканальной связи при решении системы радиальных уравнений (1). Для устранения указанной трудности мы использовали многоразрядную арифметику^{/8/}. В данной работе нами были вычислены матричные элементы вплоть до значения $n_{max} = 54$ и $\ell_{max} = 3$. Это позволяет получить потенциальные кривые с точностью $\sim 0,0001$ а.е.

Для непрерывного продолжения потенциальных кривых и матричных элементов неадиабатической связи, вычисленных в узлах сетки ($0 \leq R \leq R_{max}$) изменения гиперрадиуса R , применялась кубическая сплайн-интерполяция. Ошибка от этой интерполяции много меньше других вычислительных ошибок. Задача Штурма-Лиувилля (1)-(2) аппроксимировалась на неравномерной сетке с помощью трехточечных конечно-разностных формул второго порядка точности относительно шага сетки. Для решения возникающей при этом обобщенной алгебраической задачи на собственные значения был использован метод итерации подпространств^{/9/}, позволяющий одновременно находить несколько первых собственных значений и сеточных собственных функций.

Точность окончательного результата зависит от числа N уравнений в системе (1), значения R_{max} правой границы области интегрирования, шага разностной сетки ΔR и количества учитываемых в разложении (5) членов ($\ell_{max} + 1$ бисферических гармоник и $n_{max}/\ell + 1$ полиномов Якоби). Для практического определения порядка сходимости сеточного решения относительно шага ΔR и возможности последующей

экстраполяции по Ричардсону этого решения проведены расчеты основного состояния отрицательного иона водорода на последовательности вдвое сгущающихся сеток (см. таблицу I). Анализ результатов, полученных для некоторых наборов параметров вычислительной схемы и разложения по гиперсферическому базису, показывает, что сеточное решение обладает скоростью сходимости, соответствующей порядку использованной конечно-разностной аппроксимации. Это позволяет провести уточнение разностных решений с помощью экстраполяции по Ричардсону. Исследование сходимости гиперсферического базиса по числу включенных в систему (I) уравнений и количеству $\ell_{max}+1$, использованных в разложении (5) бисферических гармоник, мы провели также на примере основного состояния H^- . Результаты этих расчетов для различных значений указанных выше параметров, а также результаты экстраполяции по шагу сетки, представлены в таблице I. Из этой таблицы видно, что у значений энергии, вычисленных в одноканальном приближении на последовательности вдвое сгущающихся сеток, изменяется лишь пятый знак после запятой, тогда как последовательное включение второго, а затем третьего канала приводит к изменению третьего и, соответственно, четвертого знака после запятой. Последующее наращивание числа уравнений меняет лишь пятую цифру в значении энергии. Дальнейший анализ таблицы I показывает, что при добавлении членов с учетом

$\ell_{max}=2$ результирующая энергия изменяется в четвертом знаке (~ на 0,00086 а.е.), что остается справедливым и при добавлении $\ell_{max}=3$ (~ на 0,00018 а.е.). Таким образом, учет только s, p, d и f волн недостаточен для того, чтобы установить у энергии четвертый знак после запятой, и, следовательно, получить значение энергии с точностью 10^{-4} а.е. Этот вывод полностью согласуется с результатами анализа, выполненного в рамках метода наложения конфигураций в работе /13/. Вычисленное в нашей работе наилучшее значение энергии основного состояния H^- равно -0,5274 а.е., что находится в хорошем согласии с прецизионным вариационным расчетом Пекериса $E_{var} = -0,5277$ а.е. /10/.

В работе /6/ представлен расчет основного состояния атома гелия в двухканальном приближении и приведены значения параметров, при которых он был выполнен. Это дало нам возможность воспроизвести этот расчет в рамках нашей вычислительной схемы. Мы получили значение $E_0 = -2,8987$ а.е., что хорошо согласуется со значением $E_0 = -2,899$ а.е., приведенным в работе /6/. Аналогичный расчет в одноканальном приближении дает значение $E_0 = -2,8956$ а.е. для He и $E_0 = -0,5257$ а.е. для H^- . В работе /11/ в этом же приближении получены значения $E_0 = -2,895$ а.е. для He и $E_0 = -0,5259$ а.е. для H^- .

Таблица I. Зависимость энергии основного состояния H^- (в а.е.) от параметров разностной схемы и гиперсферического базиса ($N, \Delta R, \ell_{max}$)
 $R_{max} = 20, n_{max} = 54$.

ℓ_{max}	N	ΔR			Экстраполяция
		0,04	0,02	0,01	
I	I	-0,5246964	-0,5246894	-0,5246876	-0,5246870
I	2	-0,5259022	-0,5258955	-0,5258937	-0,5258931
I	3	-0,5263826	-0,5263760	-0,5263743	-0,5263737
I	4	-0,5263948	-0,5263882	-0,5263864	-0,5263858
I	5	-0,5264134	-0,5264068	-0,5264050	-0,5264044
I	6	-0,5264138	-0,5264072	-0,5264054	-0,5264048
2	6	-0,5272740	-0,5272673	-0,5272655	-0,5272649
3	6	-0,5274557	-0,5274490	-0,5274472	-0,5274466

Таблица 2. Энергии основных состояний H^-, He, Li^+, Be^{++} (в а.е.)

	Метод Хартри-Фока /13/	Метод наложения конфигураций /13/	Вариационный расчет /10, 12/	Настоящий расчет
H^-	-0,4879	-0,52747	-0,52775	-0,52745
He	-2,8617	-2,90307	-2,90372	-2,90319
Li^+	-7,2364	-7,27908	-7,27991	-7,27972
Be^{++}	-13,6113	-13,65481	-13,65556	-13,65454

Исследования, аналогичные приведенным в таблице I, были проведены также для основных состояний He, Li^+ , Be^{++} . Они подтверждают сделанные выше выводы относительно зависимости значений энергий от параметров разностной схемы и гиперсферического базиса. Окончательные результаты, полученные путем экстраполяции по шагу сетки для основных состояний H^-, He, Li^+, Be^{++} , представлены в таблице 2, где они сравниваются с результатами расчетов вариационным методом, методом Хартри-Фока и методом наложения конфигураций. В этой таблице мы приводим результаты расчетов методом наложения конфигураций, взятые

из работы [13], в которых были учтены так же, как и в наших вычислениях, s , p , d и f волны. Как и следовало ожидать, результаты очень близки друг к другу.

Проведенный выше анализ убедительно свидетельствует о том, что для получения уровней энергии с высокой точностью недостаточно только повышать точность вычисления потенциальных кривых, но необходимо также увеличивать число радиальных уравнений системы (I). Так, для расчета основных состояний гелиеподобных систем с точностью $\sim 10^{-4}$ а.е. необходимо учесть не менее трех каналов. Таким образом, разумный выбор параметров гиперсферического базиса позволяет при относительно небольших затратах машинного времени получать значения энергий с достаточно высокой точностью.

До настоящего времени метод гиперсферических координат применялся в основном для качественного изучения угловых и радиальных корреляций, а также для вычисления и классификации уровней энергии в адиабатическом приближении. В данной работе продемонстрированы реальные возможности успешного использования многоканального варианта метода гиперсферических координат в высокоточных расчетах спектров двухэлектронных систем.

В заключение авторы благодарят С.И.Виницкого, Т.М.Заяца, М.С.Касчиева, Л.И.Пономареву, К.В.Шитикову за сотрудничество и полезные обсуждения.

Литература

1. Masek J.H., J.Phys. B., v. 1, 1968, p. 831.
2. Lin C.D., Phys.Rev. A., v. 10, 1974, p. 1986.
3. Klar H., Klar M., J.Phys. B., v.13, 1980, p. 1057.
4. Greene C.H., J.Phys. B., v. 13, 1980, p. L39.
5. Fano U., Rep. Prog. Phys., v. 46, 1983, p. 97.
6. Hornos J.E., MacDowell S.W., Caldwell C.D., Phys. Rev. A., v. 33, 1986, p. 2212.
7. Haftel M.I., Mandelzweig V.B., Ann.Phys., v. 150, 1983, p. 48.
8. Пойда В.Ю., Ростовцев В.А., ОИЯИ, ПИ-86-526, Дубна, 1986.
9. Bathe K.-J., Finite element procedures in engineering analysis. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, 1982.
10. Pekeris C.L., Phys.Rev., v.126, 1962, p. 1470.
11. Park C.H., Starace A.F., Phys.Rev. A., v. 29, 1984, p. 442.
12. Pekeris C.L., Phys.Rev., v. 112, 1958, p. 1649.
13. Weiss A.W., Phys.Rev., v. 122, 1961, p. 1826.

Рукопись поступила в издательский отдел
2 февраля 1988 года

Абрашкевич А.Г. и др.

P4-88-91

Многоканальный расчет энергий основных состояний
гелиеподобных систем в рамках метода гиперсферических координат

Впервые в многоканальном варианте метода гиперсферических координат рассчитаны энергии основных состояний атома He и ионов H^- , Li^+ , Be^{++} . Численно изучена сходимость гиперсферического адиабатического базиса. При решении системы радиальных уравнений учитывалось от одного до шести каналов. При этом в разложении по бисферическим гармоникам использовались члены с орбитальным моментом от нуля до $l_{max} = 3$. Показано, что для получения энергий с точностью $\sim 0,0001$ а.е. необходимо решить систему не менее, чем из трех радиальных уравнений. Получено хорошее согласие с результатами аналогичных вычислений другими методами. Показано, что многоканальный вариант метода гиперсферических координат может успешно применяться, наряду с известными методами, для расчета спектров двухэлектронных систем.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод авторов

Abrashkevich A.G. et al.

P4-88-91

Multichannel Computation of the Ground-State Energies
of Helium-Like Systems within the Hyperspherical Coordinate Method

For the first time the multichannel version of the hyperspherical coordinate method is applied to compute the ground-state energies of He atom and H^- , Li^+ , Be^{++} ions. The convergence of the hyperspherical adiabatic basis is studied numerically. When solving the system of radial equations, account was taken of one to six channels; and in the expansion over bispherical harmonics use was made of the terms with orbital momenta in the range from zero to $l_{max} = 3$. It is shown that for determining the energies up to about 0.0001 a. u. it is necessary to solve a system of at least three radial equations. Good agreement is obtained with analogous calculations by other methods. It has been shown that the multichannel version of the hyperspherical coordinate method can be successfully used to calculate the spectra of two-electron systems.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988