

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



8884

ЭКЗ ЧИТ. ЗАЛА

Р4 - 8884

Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина

НЕПРЕРЫВНЫЙ АНАЛОГ МЕТОДА НЬЮТОНА
ДЛЯ НАХОЖДЕНИЯ КВАЗИСТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ
УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

1975

P4 - 8884

Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина

НЕПРЕРЫВНЫЙ АНАЛОГ МЕТОДА НЬЮТОНА
ДЛЯ НАХОЖДЕНИЯ КВАЗИСТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ
УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Submitted to Journal of Computational
Physics

1. Введение

Данная работа является дальнейшим развитием исследований /1/, в которых был разработан и реализован метод численного решения уравнения Шредингера для случая дискретного спектра. В настоящей работе предложенный алгоритм обобщен и применен для нахождения квазистационарных решений системы уравнений Шредингера.

Задачи мезоатомной физики, в которых развиваемый метод был использован, предъявляют повышенные требования к устойчивости вычислительной схемы, поскольку в этом случае необходимо учитывать далекодействующий характер эффективных потенциалов задачи, и, кроме того, с достаточной точностью находить энергии и волновые функции стационарных и квазистационарных состояний уравнения Шредингера вблизи границы континуума. В предлагаемой вычислительной схеме учитываются оба эти требования.

Квазистационарное состояние квантовой системы определяют обычно, сопоставляя ему решение уравнения Шредингера

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{L(L+1)}{x^2} + 2M(E - V(x)) \right] \chi(x) = 0 \quad (1)$$

при комплексных значениях энергии

причем E_0 называют энергией, а Γ - шириной квазистационарного состояния (или резонанса). С вычислительной точки зрения это определение неудобно.

В задачах рассеяния резонанс определяют через фазу $\delta_L(E)$ асимптотики решений уравнения (I)

$$\chi(x) \sim \sin(kx - \frac{L\pi}{2} + \delta_L(E)), \quad (3)$$

$$k = [2M(E - V(\infty))]^{1/2}. \quad (3a)$$

Энергия резонанса E_0 находится при этом из условий

$$\delta_L(E_0) = \pi(n + 1/2), \quad \left. \frac{\partial \delta_L(E)}{\partial E} \right|_{E=E_0} > 0, \quad (4)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$. В этом подходе ширина резонанса вычисляется из соотношения

$$\Gamma \approx 2 \left. \frac{\partial \delta_L(E)}{\partial E} \right|_{E=E_0}, \quad (5)$$

которое следует из представления фазы рассеяния в области резонанса

$$\delta_L(E) = \delta_{pot}(E) - \arctg \frac{\Gamma}{2(E - E_0)} \quad (6)$$

при дополнительном предположении $\partial \delta_{pot} / \partial E \ll 2/\Gamma$ /2, 3/.

Характерной особенностью решений $\chi(x)$ уравнения (I), соответствующих квазистационарным уровням квантовой системы, является их большая амплитуда в области действия потенциала

$$0 \leq x \leq x_3$$

по сравнению с амплитудой при $x > x_3$ (см. рис. I)^{x)}. Количественно это увеличение амплитуды решения можно выразить соотношением /2/

$$\chi(x) = \left(\frac{k}{M\Gamma}\right)^{1/2} \bar{\chi}(x), \quad (7)$$

где нормировка $\bar{\chi}(x)$ определена асимптотическим соотношением (3), а функция $\bar{\chi}(x)$ задана в области действия потенциала и нормирована условием

$$\int_0^{x_0} \bar{\chi}^2(x) dx = 1. \quad (8)$$

Из равенств (7) и (8) следует соотношение

$$\Gamma \approx \frac{k}{M} / \int_0^{x_0} \chi^2(x) dx. \quad (9)$$

В данной работе энергия и ширина резонанса определяются соотношениями (4) и (9) соответственно^{xx)}.

x) Это свойство квазистационарных решений также можно принять за их определение. Известно, что все определения квазистационарных состояний совпадают между собой в пределе $\Gamma \rightarrow 0$ /2, 3/. Вопрос о том, какое из них наиболее последовательно с вычислительной точки зрения, до сих пор не исследован с достаточной полнотой.

xx) Равенство (9) является приближенным, поскольку выбор точки x_0 (первый нуль $\chi(x)$ вне области действия потенциала) в качестве предела интегрирования в значительной мере произволен. Этот произвол связан с общей неопределенностью понятия "область действия потенциала". Однако возникающая погрешность несущественна ввиду нестрогости самого понятия "ширина резонанса", а также потому что в области $x_2 < x < x_0$ волновая функция $\chi(x)$ экспоненциально затухает (см. рис. I). Определение (9) несущественно отличается от определения Пика^{/4/}.

2. Постановка задачи о вычислении квазистационарных решений системы уравнений Шредингера

В общем случае задача об определении собственных значений (уровней энергии) и собственных (волновых) функций системы связанных дифференциальных уравнений Шредингера формулируется следующим образом.

Пусть дана система обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{li}(E, \vec{\chi}(x)) \equiv & \left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{L(L+1)}{x^2} + 2M(E - V_i(x)) \right] \chi_i(x) - \\ & - \sum_{j=1}^N V_{ij}(x) \chi_j(x) - 2 \sum_{j=1}^N Q_{ij}(x) \frac{d}{dx} \chi_j(x) = 0, \end{aligned} \quad (I0)$$

где $0 \leq x < \infty$, $i=1, 2, \dots, N$, \sum' означает суммирование по всем $j \neq i$, а потенциалы, то есть коэффициенты системы, обладают следующими асимптотическими свойствами:

$$\text{при } x \rightarrow 0 \quad x^2 V_i(x) \rightarrow \text{const}, x^2 V_{ij}(x) \rightarrow \text{const}, x Q_{ij}(x) \rightarrow \text{const}, \quad (II)$$

$$\text{при } x \rightarrow \infty \quad V_i(x) \rightarrow \text{const}, x^2 V_{ij}(x) \rightarrow 0, Q_{ij}(x) \rightarrow 0,$$

причем

$$0 = V_1(\infty) \leq V_2(\infty) \leq \dots \leq V_N(\infty). \quad (I2)$$

Условие (I2) определяет начало отсчета энергии E .

При $x=0$ рассматриваются краевые условия

$$\chi_i(0) = 0. \quad (I3)$$

В соответствии с установившейся терминологией уравнения, на которые распадается система (I0) при $x \rightarrow \infty$, будем называть каналами реакции.

При $E < 0$ все каналы закрыты, то есть ограниченные нетривиальные решения задачи (I0), (I3) возможны только при дискретных значениях $E^{(v)}$, каждому из которых соответствует вектор собственных функций $\vec{\chi}^{(v)}(x) = (\chi_1^{(v)}(x), \chi_2^{(v)}(x), \dots, \chi_N^{(v)}(x))$. (Индекс v в дальнейшем будем опускать). Асимптотика решений $\vec{\chi}_i(x)$ при $x \rightarrow \infty$ имеет вид

$$\vec{\chi}_i(x) \sim \exp\{-\alpha_i x\}, \quad (I4)$$

где

$$\alpha_i = [2M(V_i(\infty) - E)]^{1/2} \quad (I5)$$

В случае $V_S(\infty) > E > 0$ ($1 \leq S \leq N$) асимптотика в каналах $i \geq S$ остается в виде (I4), а в каналах $i < S$ становится осциллирующей:

$$\vec{\chi}_i(x) \sim \sin(k_i x - \frac{L\pi}{2} + \delta_L^{(i)}(k_i)), \quad (I6)$$

где

$$k_i = [2M(E - V_i(\infty))]^{1/2}, \quad (I7)$$

а $\delta_L^{(i)}(k_i)$ - фаза рассеяния.

Наиболее распространенным подходом к решению задач, соответствующих непрерывному спектру ($E > 0$) системы (I0), является непосредственное интегрирование этой системы при заданных значениях E с начальными условиями (I3) и начальными значениями производных $\chi_i'(0) = d_i$, которые определяют нормировку волновых функций. Сравнение полученных решений с асимптотическим выражением (I6) при $k_i x \gg 1$ позволяет найти фазы рассеяния $\delta_L^{(i)}(k_i)$.

Однако эту постановку задачи можно обратить и вместо задачи Коши решать задачу на собственные значения, то есть находить

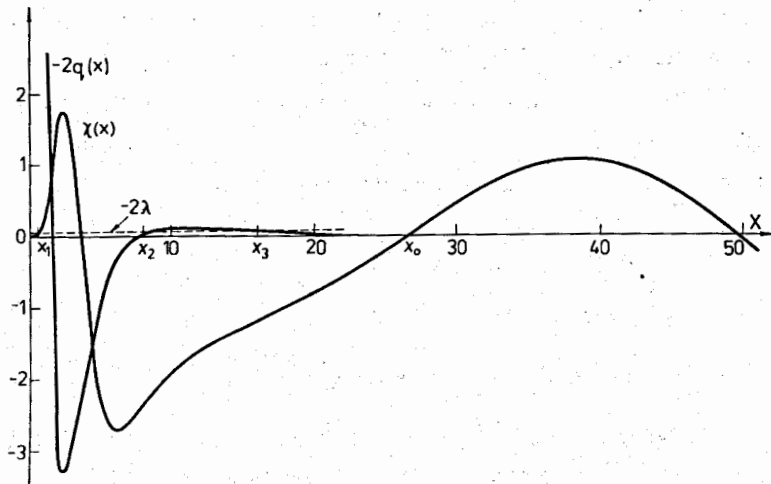


Рис. 1. Собственное значение $\lambda = 2ME_0$ (пунктир) и волновая функция квазистационарного уровня $n=1$ мезомолекулы $tt\mu$ ($M=13,54$) в состоянии с полным моментом $L=2$. Приведен также эффективный потенциал $q(x) = 2MV(x) + L(L+1)/x^2$; точки повороте x_i определяются из уравнения $q(x) - \lambda = 0$.

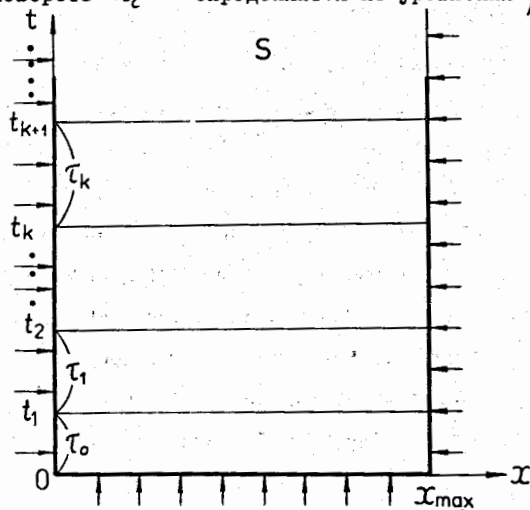


Рис. 2. Дискретное представление по параметру t эволюционной задачи (27)-(30) - аналог метода прямых для уравнений в частных производных.

E и $\vec{\chi}(x)$ по заданным значениям $\delta_L^{(i)}(k_i)$ с граничными условиями (I3) и (I6). Варианты такого подхода к задаче рассеяния рассмотрены в работах^{4, 5/}. В данной работе энергии квазистационарных уровней в каждом из каналов определяются из условий

$$\delta_L^{(i)}(k_i) = \pi(n_i + 1/2), \quad (I8)$$

где, согласно теореме Левинсона, $n_i = \delta_L^{(i)}(0)/\pi$ - равны числу нулей волновых функций $\chi_i(x)$ в области действия потенциалов $V_i(x)$. Ширины соответствующих резонансов вычисляются по формуле

$$\Gamma_i = \frac{k_i}{M} / \int_0^{x_{oi}} \chi_i^2(x) dx. \quad (I9)$$

3. Непрерывный аналог метода Ньютона (САМЕН)

Схема приближенного вычисления основных характеристик квазистационарных состояний (схема САМЕН), реализованная в настоящей работе при решении задачи (I0), (I3)-(I8), является дальнейшим развитием алгоритма, предложенного в работе авторов^{I/}.

Для применения схемы САМЕН необходимо исходную задачу (I0), (I3)-(I8), заданную на полуоси $0 \leq x < \infty$, аппроксимировать на конечном интервале $0 \leq x \leq x_m$, а именно, задать граничные условия в виде

$$\begin{aligned} g_{\alpha i}(E, \vec{\chi}(x)) &\equiv \left[g_{\alpha i}(E) \frac{d}{dx} + f_{\alpha i}(E) \right] \chi_i(x) \Big|_{x=b_{\alpha}} = 0, \\ f_{\alpha i}^2(E) + g_{\alpha i}^2(E) &> 0, \\ \alpha &= 2, 3; \quad i = 1, 2, \dots, N; \quad b_2 = 0, \quad b_3 = x_m. \end{aligned} \quad (20)$$

Эта процедура, требующая особой аккуратности в случае дальнедейст-

вующих потенциалов и малых значений E , будет подробно рассмотрена ниже.

Заметим, что именно сведение исходной задачи на конечный интервал позволяет решать задачи дискретного и непрерывного спектров единообразным способом, как задачи на собственные значения.

В схеме САМЕН /I/ задача на собственные значения (10), (20) доопределяется условием нормировки

$$\varphi_4(E, \vec{y}(x)) \equiv \sum_{j=1}^N \varphi_{4j} - 1 \equiv \sum_{j=1}^N \left[\int_0^{x_m} \chi_j^2(x) dx + c_j^2 \int_{x_m}^{\infty} \tilde{\chi}_j^2(E, x) dx \right] - 1 = 0, \quad (21)$$

где $\tilde{\chi}_j(E, x)$ - известная асимптотика решений системы (10), главные члены которой имеют вид (14) и (16). Константы c_j при решениях в закрытых каналах определяются из условия сшивания

$$\chi_j(x_m) = c_j \tilde{\chi}_j(E, x_m), \quad (22)$$

а в открытых каналах полагаются равными нулю. После нахождения решений, в окончательном результате следует перейти к нормировке, не зависящей от выбора x_m , например, к нормировке на единичную амплитуду (16) в том из открытых каналов реакции, для которого вычисляется ширина резонанса Γ_i по формуле (19).

Сформулированную таким образом задачу на собственные значения (10), (20), (21) можно свести к решению функционального уравнения

$$\varphi(\mathcal{Z}) = 0, \quad \mathcal{Z} = (E, \vec{y}(x)). \quad (23)$$

Здесь φ обозначает совокупность (10), (20), (21) операторов $\varphi = \{\varphi_{\alpha i}\}$, $\alpha = 1, 2, 3, 4$; $i = 1, 2, \dots, N$, отображающих множество элементов $\mathcal{Z} = (E, \vec{y}(x))$ пространства $\mathcal{Z} = R \times C^2[0, x_m]^N$ с асимптотикой функций $\chi_i(x) \sim x^{L+1}$ $x \rightarrow 0$

в пространство $R^3 \times C[0, x_m]^N$. В соответствии уравнению (23) ставится эволюционное уравнение, зависящее от некоторого непрерывного параметра t :

$$\varphi'(\mathcal{Z}(t)) \frac{d\mathcal{Z}}{dt} = -\varphi(\mathcal{Z}(t)), \quad 0 \leq t < \infty. \quad (24)$$

При достаточно общих предположениях о дифференциальных свойствах оператора φ в окрестности искомого решения \mathcal{Z}^* и существовании начального приближения \mathcal{Z}_0 к нему,

$$\mathcal{Z}_0 = \mathcal{Z}(0) = (E_0, \vec{y}_0(x)), \quad (25)$$

задача (24), (25) имеет решение $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}(t)$ при всех t , причем $\lim_{t \rightarrow \infty} \|\mathcal{Z}(t) - \mathcal{Z}^*\| = 0$ /I/.

Дискретное представление эволюционного уравнения (24), (25) позволяет построить устойчивые вычислительные схемы на основе методов приближенного решения этого уравнения. Достоинство этих схем состоит также в том, что в них собственные значения E и собственные функции $\chi_i(x)$ равноправны, находятся в едином вычислительном процессе и потому определяются с одинаковой относительной точностью. Кроме того, излагаемый подход позволяет использовать априорную информацию о решениях физической задачи при построении начального приближения (25).

Предполагая непрерывную зависимость \mathcal{Z} от параметра t ($0 \leq t < \infty$), то есть полагая

$$E = E(t), \quad \vec{y} = \vec{y}(x, t), \quad (26)$$

можно перейти, в соответствии с (24), к эволюционной задаче относительно функций $E(t), \vec{y}(x, t)$ и

$$\begin{aligned} \mu(t) &= (d/dt)E(t), \\ \vec{v}(x,t) &= (\partial/\partial t)\vec{f}(x,t), \end{aligned} \quad (27)$$

определенной в полуполосе $S: 0 \leq x \leq x_m, 0 \leq t < \infty$,

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{L(L+1)}{x^2} + 2M(E(t) - V_i(x)) \right] v_i(x,t) - \sum_{j=1}^{N'} V_{ij}(x) v_j(x,t) - \\ - 2 \sum_{j=1}^{N'} Q_{ij}(x) \frac{\partial}{\partial x} v_j(x,t) = -\varphi_{ii}(E(t), \vec{f}(x,t)) - 2M\mu(t) f_i(x,t). \end{aligned} \quad (28)$$

Из соотношений (20) и (21) с учетом (27) следуют граничные условия

$$\begin{aligned} \left[g_{\alpha i}(E(t)) \frac{\partial}{\partial x} + f_{\alpha i}(E(t)) \right] v_i(x,t) \Big|_{x=b_\alpha} = -\varphi_{\alpha i}(E(t), \vec{f}(x,t)) - \\ - \mu(t) \left[\frac{dg_{\alpha i}}{dE} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{df_{\alpha i}}{dE} \right] f_i(x,t) \Big|_{x=b_\alpha} \end{aligned} \quad (29)$$

и аналог условия нормировки

$$\begin{aligned} 2 \sum_{j=1}^{N'} \left[\int_0^{x_m} f_j(x,t) v_j(x,t) dx + \mu(t) c_j^2 \int_{x_m}^{\infty} \tilde{f}_j(E(t), x) \frac{\partial \tilde{f}_j(E(t), x)}{\partial E} dx = \right. \\ \left. = -\varphi_j(E(t), \vec{f}(x,t)). \right. \end{aligned} \quad (30)$$

(Здесь предполагается, что при наличии аргумента t в операторах φ_i оператор $\frac{d}{dx}$ заменяется на $\frac{\partial}{\partial x}$).

Для решения задачи (28)-(30) в полуполосе S (рис. 2) можно применить аналог метода прямых для решения уравнений в частных производных^{/6/}, эквивалентный методу Эйлера для решения задачи (24)-(25). При этом полуполоса S разбивается прямыми $t=t_n$ с шагом τ_n :

$$t_{n+1} = t_n + \tau_n. \quad (31)$$

Предположим, что на прямой $t=t_n$ известны

$$E_n = E(t_n), \quad f_{in}(x) = f_i(x, t_n).$$

Тогда, исходя из соотношений (28) и (29), можно на этой прямой при $0 \leq x \leq x_m$ рассмотреть краевую задачу относительно функций $v_{in}(x) = v_i(x, t_n)$ ($i=1, 2, \dots, N'$).

$$\begin{aligned} \left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{L(L+1)}{x^2} + 2M(E_n - V_i(x)) \right] v_{in}(x) - \sum_{j=1}^{N'} V_{ij}(x) v_{jn}(x) - \\ - 2 \sum_{j=1}^{N'} Q_{ij}(x) \frac{d}{dx} v_{jn}(x) = F_{in}^{(1)}(x) + \mu_n F_{in}^{(2)}(x), \end{aligned} \quad (32)$$

$$\left[g_{\alpha i}(E_n) \frac{d}{dx} + f_{\alpha i}(E_n) \right] v_{in}(x) \Big|_{x=b_\alpha} = G_{\alpha in}^{(1)} + \mu_n G_{\alpha in}^{(2)}, \quad (33)$$

где

$$\begin{aligned} \mu_n &= \mu(t_n), \\ F_{in}^{(1)}(x) &= - \left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{L(L+1)}{x^2} + 2M(E_n - V_i(x)) \right] f_{in}(x) + \\ &+ \sum_{j=1}^{N'} V_{ij}(x) f_{jn}(x) + 2 \sum_{j=1}^{N'} Q_{ij}(x) \frac{d}{dx} f_{jn}(x), \\ F_{in}^{(2)}(x) &= -2M f_{in}(x), \\ G_{\alpha in}^{(1)} &= - \left[g_{\alpha i}(E_n) \frac{d}{dx} + f_{\alpha i}(E_n) \right] f_{in}(x) \Big|_{x=b_\alpha}, \\ G_{\alpha in}^{(2)} &= - \left[\frac{dg_{\alpha i}(E_n)}{dE} \frac{d}{dx} + \frac{df_{\alpha i}(E_n)}{dE} \right] f_{in}(x) \Big|_{x=b_\alpha}, \\ &\alpha = 2, 3; \quad b_2 = 0, \quad b_3 = x_m. \end{aligned} \quad (34)$$

Решение этой задачи с неизвестным параметром μ_n можно представить в виде

$$\psi_{in}(x) = \psi_{in}^{(1)}(x) + \mu_n \psi_{in}^{(2)}(x), \quad (35)$$

где функции $\psi_{in}^{(m)}(x)$ ($m=1, 2$) являются решениями краевых задач

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{L(L+1)}{x^2} + 2M(E_n - V_i(x)) \right] \psi_{in}^{(m)}(x) - \sum_{j=1}^{N'} V_{ij}(x) \psi_{jn}^{(m)}(x) - 2 \sum_{j=1}^{N'} Q_{ij}(x) \frac{d}{dx} \psi_{jn}^{(m)}(x) = F_n^{(m)}(x), \quad (36)$$

$$\left[g_{\alpha i}(E_n) \frac{d}{dx} + f_{\alpha i}(E_n) \right] \psi_{in}^{(m)}(x) \Big|_{x=\alpha} = G_{\alpha in}^{(m)}. \quad (37)$$

Определив отсюда функции $\psi_{in}^{(1)}(x)$ и $\psi_{in}^{(2)}(x)$, вычисляем параметр μ_n из соотношения (30), которое при $t=t_n$ принимает вид

$$\sum_{j=1}^{N'} \left[\int_0^{x_m} \chi_{jn}(x) \psi_{jn}(x) dx + \mu_n c_{jn}^2 \int_{x_m}^{\infty} \tilde{\chi}_j(E_n, x) \frac{\partial \tilde{\chi}_j(E_n, x)}{\partial E} dx \right] = -\frac{1}{2} \varphi_4(E_n, \vec{f}_n(x)), \quad (38)$$

где $c_{jn} = \chi_{jn}(x_m) / \tilde{\chi}_j(E_n, x_m)$.

Подставляя в (38) выражение (35) для $\psi_{in}(x)$, окончательно получим следующую формулу для определения μ_n :

$$\mu_n = -\frac{1}{2} \mathcal{G}_1 / \mathcal{G}_2, \quad (39)$$

где

$$\mathcal{G}_1 = \sum_{j=1}^{N'} \left[\int_0^{x_m} (\chi_{jn}^2(x) - 2\chi_{jn}(x) \psi_{jn}^{(1)}(x)) dx + c_{jn}^2 \int_{x_m}^{\infty} \tilde{\chi}_j^2(E_n, x) dx \right] - 1, \\ \mathcal{G}_2 = \sum_{j=1}^{N'} \left[\int_0^{x_m} \chi_{jn}(x) \psi_{jn}^{(2)}(x) dx + c_{jn}^2 \int_{x_m}^{\infty} \tilde{\chi}_j(E_n, x) \frac{\partial \tilde{\chi}_j(E_n, x)}{\partial E} dx \right]. \quad (40)$$

Таким образом, функции $\psi_{in}(x)$, заданные соотношениями (35), полностью определены на прямой $t=t_n$. Для перехода на следующую прямую $t=t_{n+1}$ можно воспользоваться простейшей разностной аппроксимацией дифференциальных соотношений (27)

$$E_{n+1} = E_n + \tau_n \mu_n, \quad \chi_{in+1}(x) = \chi_{in}(x) + \tau_n \psi_{in}(x). \quad (41)$$

Поскольку предполагается, что начальное приближение (25) к искомому решению задачи известно, то схема САМЕН последовательного определения $E_n, \chi_n(x)$, заданная формулами (36), (37), (34), (39), (40), (35), (41), полностью определена.

Решение краевых задач (36), (37) можно реализовать любым известным методом. В случае, когда потенциалы $V_i(x), V_j(x), Q_{ij}(x)$ заданы таблично на некоторой сетке узлов интервала $0 \leq x \leq x_m$, целесообразно использовать конечноразностную аппроксимацию этих краевых задач и алгоритм матричной прогонки^{17/} для их решения.

4. Применение схемы САМЕН в задачах мезомолекулярной физики

Некоторые особенности реализации схемы САМЕН (в частности, постановку граничных условий) проследим на примере вычисления квази-стационарных уровней мезомолекул водорода.

В двухуровневом приближении адиабатического представления задачи трех тел энергии E_0 квазистационарных состояний мезомолекул с ядрами различных изотопов водорода находятся из системы уравнений (10) при $N = 2$. Выражения для приведенной массы M и эффективных потенциалов $V_i(x)$, $V_j(x)$ и $Q_{ij}(x)$ системы приведены в работе^{8/}, в которой излагаемая схема была использована для нахождения дискретных уровней мезомолекул водорода.

Асимптотика потенциалов $V_i(x)$ для рассматриваемого случая имеет вид

$$V_i(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} c_4 x^{-4} + c_6 x^{-6}, \quad (42)$$

$$c_4 = -9/4, \quad c_6 = -15/2. \quad (43)$$

Через величины c_4 и c_6 определяются коэффициенты асимптотического разложения решения $\chi(x) = (\chi_1(x), \chi_2(x))$ вплоть до членов $\sim x^{-6}$:

в закрытом канале

$$\tilde{\chi}_2(x) = c \exp\{-\alpha_2 x\} \sum_{n=0}^6 \alpha_n x^{-n}, \quad (44)$$

где α_n определены в /1/;

в открытом канале ($\xi = k_1 x$)

$$\tilde{\chi}_1(x) = (-1)^{n+1} A \left[\left(-1 + \sum_{s=1}^3 d_s \xi^{-2s} \right) \cos\left(\xi - \frac{L\xi}{2}\right) + \sum_{s=1}^4 b_s \xi^{-2s+1} \sin\left(\xi - \frac{L\xi}{2}\right) \right] \quad (45)$$

Коэффициенты разложения (45) равны:

$$d_1 = \frac{1}{4} b_1 (L(L+1) - 2),$$

$$d_2 = \frac{1}{8} [2Mk_1^2 b_1 c_4 + b_2 (L(L+1) - 12)],$$

$$d_3 = \frac{1}{12} [2Mk_1^4 b_1 c_6 + 2Mk_1^2 b_2 c_4 + b_3 (L(L+1) - 30)],$$

$$b_1 = \frac{L(L+1)}{2},$$

$$b_2 = \frac{1}{6} [2Mk_1^2 c_4 - d_1 (L(L+1) - 6)], \quad (45a)$$

$$b_3 = \frac{1}{10} [2Mk_1^4 c_6 - 2Mk_1^2 c_4 d_1 - d_2 (L(L+1) - 20)],$$

$$b_4 = -\frac{1}{14} [2Mk_1^4 c_6 d_1 + 2Mk_1^2 c_4 d_2 + d_3 (L(L+1) - 42)].$$

Последующие коэффициенты разложения (45) легко находятся при подстановке его в уравнение (10) через коэффициенты c_s ($s > 6$) разложения (42) для потенциала $V_i(x)$.

Нормировка функций $\chi_i(x)$ в процессе вычисления определяется соотношением

$$\int_0^{x_m} \chi_2^2(x) dx + c^2 \int_{x_m}^{\infty} \tilde{\chi}_2^2(E, x) dx = 1, \quad (46)$$

где $c = \chi_2(x_m) / \tilde{\chi}_2(E, x_m)$. Окончательный результат нормируется условием

$$\chi_1(x_m) = \tilde{\chi}_1(E, x_m) \quad (47)$$

при $A = 1$, которое необходимо для вычисления Γ по формуле (19).

На рис. 3 представлены волновые функции квазистационарного уровня $n=0$ мезомолекулы $dt\mu$ в состоянии с полным моментом $L = 3$. Для этой системы $M = 10,894$, а вычисленные значения

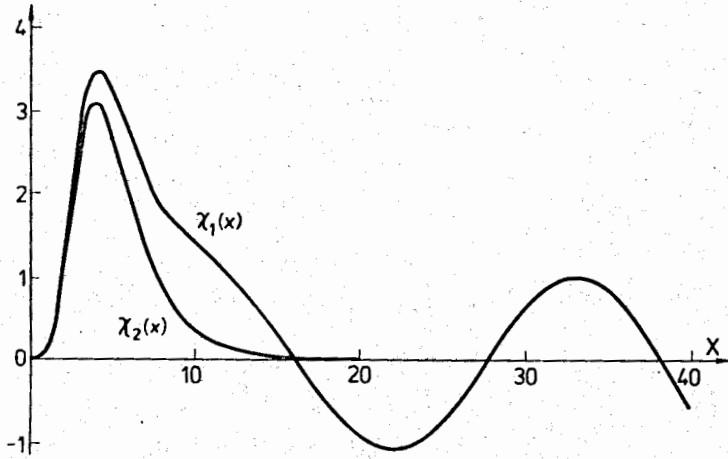


Рис. 3. Волновые функции квазистационарного состояния мезомолекулы $dtpu$ ($M=10,89, L=3, n=0$): $\chi_1(x)$ - решение в открытом канале, $\chi_2(x)$ - в закрытом.

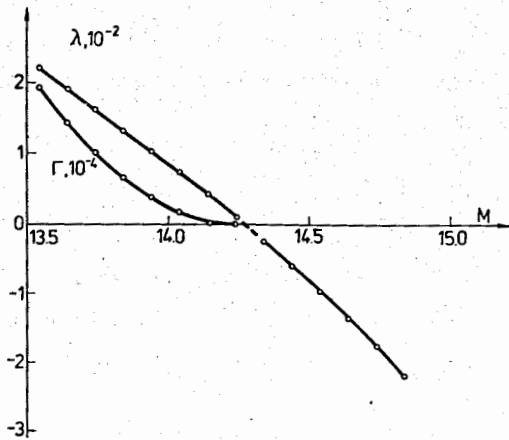


Рис. 4. Зависимость энергии E_0 и ширины Γ квазистационарного уровня $n=1, L=2$ от эффективной массы M задачи вблизи границы континуума.

E_0 и Γ равны^{*)}:

$$E_0 = 4,6 \cdot 10^{-3}, \quad \Gamma = 5,3 \cdot 10^{-4}. \quad (48)$$

Другой способ постановки граничных условий в открытом канале использует метод фазовых функций^{/9/}, который особенно нагляден для одного уравнения. В этом случае решение уравнения (1) и его первую производную можно представить в виде

$$\begin{aligned} \chi(x) &= A(x) [\cos \delta_L^*(k, x) j_L(kx) - \sin \delta_L^*(k, x) n_L(kx)], \\ \chi'(x) &= k A(x) [\cos \delta_L^*(k, x) j_L'(kx) - \sin \delta_L^*(k, x) n_L'(kx)], \end{aligned} \quad (49)$$

где $j_L(kx)$ и $n_L(kx)$ - функции Риккати-Бесселя, нормированные асимптотическим условием (3) при $\delta_L^*(k) = 0$ для $j_L(kx)$ и аналогичным условием для $n_L(kx)$ с заменой

$$\sin(kx - \frac{L\pi}{2}) \rightarrow -\cos(kx - \frac{L\pi}{2}).$$

Фазовая функция $\delta_L^*(k, x)$

удовлетворяет уравнению:

$$\frac{d}{dx} \delta_L^*(k, x) = - \frac{2MV(x)}{k} [\cos \delta_L^*(k, x) j_L(kx) - \sin \delta_L^*(k, x) n_L(kx)]^2, \quad (50)$$

$$\delta_L^*(k, 0) = 0,$$

а исконая фаза определяется равенством $\delta_L^*(k) = \delta_L^*(k, \infty)$.

*) Результат приведен в единицах задачи. Соответствующие величины в электрон-вольтах равны:

$$E = 25,2 \text{ эВ}, \quad \Gamma = 2,9 \text{ эВ}.$$

Приведенные значения вычислены при выборе граничной точки $x_m = 40$ и шаге разностной сетки $h = 0,1$.

При больших, но конечных $x = x_m$ фазу, соответствующую квазистационарному состоянию, можно представить в виде

$$\delta_L(k, x_m) = \pi(n + 1/2) + \varepsilon, \quad (51)$$

где $\varepsilon = \varepsilon(k, x_m) \ll 1$. Подстановка (51) в (49) и (50) приводит (с точностью до членов $\sim \varepsilon^2$) к следующим соотношениям:

$$\left. \frac{\chi'(x)}{\chi(x)} \right|_{x=x_m} = k \frac{\sin \varepsilon j_L(\zeta) - \cos \varepsilon n_L'(\zeta)}{\sin \varepsilon j_L(\zeta) - \cos \varepsilon n_L(\zeta)}, \quad \zeta = kx_m, \quad (52)$$

$$\varepsilon \approx \frac{2M}{k} \int_{x_m}^{\infty} V(x) n_L^2(kx) dx \approx 2Mk^2 \int_{\zeta}^{\infty} (c_4 \zeta^{-4} + k^2 c_6 \zeta^{-6}) n_L^2(\zeta) d\zeta.$$

Полагая $\varepsilon = 0$, приходим к граничным условиям, которые использовал Пик^{/4/} в точке $x = x_3$ (см. рис. 1). Легко видеть, однако, что при $x = x_3 \approx (L + 1/2)/k$ величина $\zeta \approx L + 1/2$ и в общем случае $\varepsilon \sim 2Mk^2 c_4 \zeta^4 \neq 0$.

Оба варианта граничных условий (45) и (52) при вычислении квазистационарного уровня $L = 2$, $n = 1$ мезомолекулы $tt\mu$ привели к совпадающим результатам:

$$E_0 = 8,25 \cdot 10^{-4} \quad (E_0 = 4,55 \text{ эВ}), \quad (53)$$

$$\Gamma = 1,98 \cdot 10^{-4} \quad (\Gamma = 1,1 \text{ эВ}).$$

E_0 совпадает с вычисленным ранее^{/13/} по методу фазовых функций.

Соответствующая этому уровню волновая функция $\chi(x)$, нормированная условием (45) при $A = 1$, и эффективный потенциал $q(x) = 2MV(x)$ представлены на рис. 1.

Весьма интересно проследить зависимости величин E_0 и Γ от эффективной массы M , которые представлены на рис. 4. Начальная точка (53) соответствует квазистационарному уровню системы $tt\mu$

($M = 13,54$). При увеличении M энергия и ширина резонанса уменьшаются и обращаются в нуль при $M \approx 14,27$. При дальнейшем увеличении M уровень становится стационарным, а его энергия растет примерно пропорционально массе.

5. Выбор начального приближения, точность вычислений и характеристики сходимости метода

При больших E_0 и Γ в качестве начального приближения для $\chi(x)$ можно принять синусоиду (16). При малых E_0 и Γ , когда вид волновой функции в области действия потенциала сильно отличается от асимптотического (16), можно применить метод, идея которого выходит к Бете и Пайерлсу и состоит в следующем^{/10/}. При $E \rightarrow 0$ волновая функция квазистационарного состояния в области действия потенциала незначительно отличается от волновой функции стационарного состояния с энергией $E_{st} = -E_0$. Значение E_{st} и соответствующую ему функцию в области $0 \leq x \leq x_3$ можно найти, решая ее с граничными условиями (14) в обоих каналах. (Выбор начального приближения в стационарных задачах подробно обсуждался в работе^{/1/}). Полученные таким образом решения продолжают затем на интервал $x_3 \leq x \leq x_m$ по формулам (14) (в закрытом канале, функция $\chi_2(x)$) и (16) при значении $E_0 = -E_{st}$ (в открытом канале, функция $\chi_1(x)$). Как показывает опыт вычислений, такой выбор начального приближения обеспечивает устойчивую сходимость последовательных приближений (41) к решению исходной задачи.

Основой схемы САМЕН является программа решения линейных граничных задач (36), (37) относительно функций $\psi_{in}^{(n)}(x)$ при фиксированном значении параметра $t = t_n$. Их решение осуществляется

с помощью алгоритма прогонки. Нами была использована конечно-разностная аппроксимация с равномерным шагом h второго порядка точности по h , поскольку эффективные потенциалы исходной задачи (10) заданы таблично на равномерной сетке узлов.

В качестве величины, характеризующей сходимость вычислительного процесса по параметру t , как и в /1/, выбрано значение

$$\delta_n = \max_{k,i} | \varphi_h^{(i)}(E_n, \vec{\chi}_n(x_k)) |, \quad (54)$$

где $\varphi_h^{(i)}(E_n, \vec{\chi}_n(x_k))$ - конечноразностный оператор

$$\begin{aligned} \varphi_h^{(i)}(E_n, \vec{\chi}_n(x_k)) \equiv & h^{-2} [\chi_{in}(x_{k+h}) - 2\chi_{in}(x_k) + \chi_{in}(x_{k-h})] - \\ & - \left[\frac{L(L+1)}{x_k^2} + 2M(E_n - V_i(x_k)) \right] \chi_{in}(x_k) - \sum_{j=1}^N V_{ij}(x_k) \chi_{jn}(x_k) - \\ & - \sum_{j=1}^N Q_{ij}(x_k) [\chi_{jn}(x_{k+h}) - \chi_{jn}(x_{k-h})], \end{aligned} \quad (55)$$

аппроксимирующий (10) с точностью порядка $O(h^2)$. Условием окончания процесса вычислений является выполнение неравенства $\delta_n < \varepsilon$, где $\varepsilon > 0$ и достаточно мало. Шаг τ_n по параметру t выбирается в зависимости от скорости сходимости процесса и полагается равным $\tau_n = \tau_{n-1} \delta_{n-1} / \delta_n$.

В рамках излагаемого метода функции $\chi_i(x)$ вычисляются с той же точностью, что и энергия E . Однако для получения нормированных должным образом функций в открытом канале (то есть с единичной амплитудой при $x \rightarrow \infty$) необходимо точку x_m , в которой вычисленные функции сшиваются с асимптотикой (45), выбрать достаточно далеко (особенно при малых значениях E , так как точность сшивания $\sim 2Mk^2 \zeta^{-6}$, где $\zeta = kx_m$).

В таблице I представлены значения E_0 и $\chi(x)$ для квазистационарного состояния $n = 1$ мезомолекулы $tt\mu$ с полным моментом $L = 2$ в зависимости от выбора шага разностной сетки h и граничной точки x_m . Из таблицы видно, что значения $\chi(x)$ зависят как от h , так и от x_m . Энергия E_0 зависит от выбора x_m несколько слабее и вычисляется с удовлетворительной точностью даже при $x_m < x_0$. В соответствии с общими оценками /II/ точность вычислений $\sim h^2$ и составляет $\sim 5 \cdot 10^{-4}$ при выборе $h = 0,01$ и $x_m = 30$.

Наконец, приведем некоторые величины, характеризующие вычислительный процесс для случая мезомолекулы $dt\mu$ ($L = 3, n = 0, M = 10,89$). При параметрах сетки $h = 0,1, x_m = 40$ процесс сходится за 100 итераций, если $\tau_0 = 0,01$. Невязка для начального приближения, построенного изложенным выше способом, составляет $\delta_0 = 11,8$. В процессе вычислений она достигает величины $\delta_{100} = 3,6 \cdot 10^{-10}$. Время вычисления E_0 и $\chi(x)$ на электронной вычислительной машине СДС-6200 с выдачей промежуточной информации о сходимости процесса составляет ~ 2 мин.

6. Заключение

Предлагаемый алгоритм SAMEN реализован в виде пакета программ, написанных на языке FORTRAN. Основу пакета составляет подпрограмма SLIP1 /12/ для решения задачи (10), (20) в случае $\mathcal{N} = 1$ и аналогичная подпрограмма для системы уравнений при $\mathcal{N} = 2$. Излагаемый метод решения системы уравнений Шредингера был использован для вычисления стационарных /8/ и квазистационарных /14/ уровней мезомолекул. Во всех случаях метод показал высокую эффективность и устойчивость.

Отметим, что схему САМЕН можно использовать также для решения задач рассеяния. Для этого достаточно задать значение фазы рассеяния $\delta_l(k)$, после чего изложенный алгоритм практически без изменений позволяет определить значение энергии столкновения E и волновую функцию $\chi(x)$, которые соответствуют заданной фазе.

Авторы выражают благодарность Б.И.Липатову за помощь в проведении расчетов на ЭВМ.

Таблица I

Значения $\chi(x)$ и $\lambda \cdot = 2ME_0$ для системы $tt\mu$ ($M=13,54$)

$\lambda \cdot 10^2$	$h = 0.10$		$h = 0.04$		$h = 0.02$		$h = 0.01$		$h = 0.005$
	$x_m=16$	$x_m=64$	$x_m=16$	$x_m=64$	$x_m=16$	$x_m=64$	$x_m=16$	$x_m=64$	
	2.2124	2.2119	2.2304	2.2300	2.2330	2.2337	2.2357	2.2338	
x	Значения $\chi(x)$ в зависимости от h и x_m								
1	0.2464	0.2462	0.2450	0.2449	0.2448	0.2447	0.2447	0.2447	0.2447
4	-0.7856	-0.7852	-0.7763	-0.7759	-0.7749	-0.7746	-0.7746	-0.7745	-0.7745
7	-2.6573	-2.6569	-2.6400	-2.6388	-2.6375	-2.6369	-2.6369	-2.6367	-2.6367
10	-1.9390	-1.9382	-1.9296	-1.9289	-1.9283	-1.9280	-1.9280	-1.9279	-1.9279
13	-1.4967	-1.4964	-1.4906	-1.4903	-1.4897	-1.4895	-1.4895	-1.4894	-1.4894
16	-1.2058	-1.2059	-1.1998	-1.2000	-1.1990	-1.1988	-1.1988	-1.1987	-1.1987

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. L.I. Ponomarev, I.V. Puzynin, T.P. Puzynina. *J. Comput. Phys.* **13**, 1, 1973.
Л.И. Пономарев, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина. В сб. "Программирование и математические методы решения физических задач". ОИЯИ Д10-7707, 131, Дубна, 1974.
2. А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. Наука, М., 1971.
3. Р. Ньютон. Теория рассеяния волн и частиц. Мир, М., 1969.
4. J.M. Peek. *Physica* **64**, 93, 1973; J.M. Peek.
В сб. "Программирование и математические методы решения физических задач". ОИЯИ Д10-7707, 32, Дубна, 1974.
5. V.W. Shore. *J. Phys.*, **В7**, 2502, 1974.
6. И.С. Березин, Н.П. Жидков. Методы вычислений, II, Физматгиз, М., 1959.
7. С.К. Годунов, В.С. Рябенский. Разностные схемы, Наука, М., 1973.
8. Л.И. Пономарев, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина. *ЖЭТФ*, **65**, 28, 1973.
9. В.В. Бабиков. Метод фазовых функций в квантовой механике. Наука, М., 1968.
Ф. Кэлоджеро. Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния. Мир, М., 1972.
10. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Наука, М., 1974.
11. А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. *ЖВММФ*, **I**, 784, 1961.
А.А. Самарский. Введение в теорию разностных схем. Наука, М., 1971.
12. И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина.
Collection of Scientific Papers "Algorithms and Programs for Solution of some Problems in Physics". KFKI-74-34, 93, Budapest, 1974.
13. А.В. Матвеев, Л.И. Пономарев. *ЖЭТФ*, **58**, 1640, 1970.
14. Л.И. Пономарев, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, Доклад на VI Международной конференции по физике высоких энергий и структуре ядра, Санта-Фе, США, 1975.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 мая 1975 г.