92-297

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р4-92-297

В.Б.Беляев, О.И.Картавцев, В.И.Кочкин

ВАРИАЦИОННЫЙ РАСЧЕТ ТЕРМОВ ДЛЯ СИСТЕМЫ H^-

1992

Как было установлено в пионерской работе Масека [1], метод поверхностных гиперсферических функций является адекватным подходом для исследования поведения электронов, движущихся в кулоновском поле ядра*.

При этом, однако, остается нерешенной проблема построения самих поверхностных функций. В данной работе предлагается вариационная процедура построения этих функций, учитывающая физические асимптотики при больших и малых значениях гиперрадиуса.

Для простоты мы ограничились построением поверхностных собственных функций и собственных значений (при полном угловом моменте $L = 0$) для системы H^-.

Исходное уравнение Шредингера для системы $Z2e$ имеет вид

$$\left(-\Delta_{r_1} - \Delta_{r_2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|} + E\right)\psi = 0, \tag{1}$$

или в гиперсферических переменных ρ, α, θ

$$\left[\frac{1}{\rho^5}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^5\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{4}{\rho^2}\Box + 2E + \frac{2}{\rho}U\right]\psi = 0. \tag{2}$$

Здесь

$$r_1 = \rho\cos\frac{\alpha}{2}, \quad r_2 = \rho\sin\frac{\alpha}{2}, \quad \cos\theta = \frac{(\vec r_1\,\vec r_2)}{r_1\cdot r_2},$$

$$\Box\varphi = \frac{1}{\sin^2\alpha}\left(\frac{\partial}{\partial\alpha}\sin^2\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\varphi,$$

$$U = -\frac{1}{2}\rho V, \quad V = -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|}.$$

Будем искать решение уравнения (2) в виде

$$\tilde\psi = \sum_n v_n(\rho)\,\varphi_n(\alpha, x), \quad x = \cos\theta. \tag{3}$$

Функции $\varphi_n(\alpha, x)$ для каждого $n = 1, 2, \ldots$ являются решениями уравнения Шредингера

---

*Подробный список литературы на эту тему можно найти в обзоре [2].

$$(\Box + \rho U + \lambda_n)\,\varphi_n = 0. \tag{4}$$

Уравнения (4) решаем вариационным методом, причем

$$\varphi_n(\alpha, x) = \sum_i c_i^n\,\chi_i(\alpha, x), \tag{5}$$

где λ_n и c_i^n — собственные значения и собственные векторы уравнения (4), а $\chi_i(\alpha, x)$ есть выбираемый нами базис из системы функций, обеспечивающий точное решение при $\rho \to 0, \rho \to \infty$.

Итак, для решения уравнения

$$(\Box + \rho U + \lambda)\,\varphi = 0 \tag{6}$$

вариационным методом необходимо решить систему уравнений

$$\sum_i (D_{ki} + \rho U_{ki} + \lambda S_{ki})\,c_i^k = 0. \tag{7}$$

Здесь

$$S_{ki} = \langle\chi_k|\chi_i\rangle = \int_0^\pi \sin^2\alpha\,d\alpha\int_{-1}^{1} dx\,\chi_k(\alpha, x)\,\chi_i(\alpha, x). \tag{8}$$

$$U_{ki} = \langle\chi_k|U|\chi_i\rangle, \quad U = Z\,U^{(1)} + U^{(2)},$$
$$U^{(1)} = \sqrt{2}\,\frac{\sin\left(\frac{\alpha}{2} + \frac{\pi}{4}\right)}{\sin\alpha}, \quad U^{(2)} = -\frac{1}{\sqrt{1 - \sin\alpha\cos\theta}}, \tag{9}$$

$$U_{ki} = ZU_{ki}^{(1)} + U_{ki}^{(2)}. \tag{10}$$

$$D_{ki} = \langle\chi_k|\,\Box\,|\chi_i\rangle =$$
$$= -\int_0^\pi d\alpha\int_{-1}^{1} dx\left[\sin^2\alpha\,\frac{\partial\chi_k}{\partial\alpha}\,\frac{\partial\chi_i}{\partial\alpha} + (1 - x^2)\,\frac{\partial\chi_k}{\partial x}\,\frac{\partial\chi_i}{\partial x}\right]. \tag{11}$$

Ищем решение, симметричное при перестановке $r_1 \rightleftarrows r_2$, тогда

$$\chi_i(\alpha, x) = \left[\phi_{n_i l_i}\left(\rho\sin\frac{\alpha}{2}\right) + \phi_{n_i l_i}\left(\rho\cos\frac{\alpha}{2}\right)\right]P_{l_i}(x), \quad 1 \le i \le N_1 \tag{12}$$

$$\chi_i(\alpha, x) = \sin^{l_i}\alpha\,C^{l_i+1}_{n_i - l_i - 1}(\cos\alpha)\,P_{l_i}(x), \quad N_1 + 1 \le i \le N. \tag{13}$$

$$\phi_{nl}(y) = e^{-\frac{Zy}{n}}\left(\frac{2Zy}{n}\right)^l L^{2l+1}_{n-l-1}\left(\frac{2Zy}{n}\right). \tag{14}$$

$P_l(x)$ — многочлены Лежандра, $L_m^k(t)$, — многочлены Лагерра, $C_n^m(x)$ — многочлены Гегенбауэра (ультрасферические).

В уравнении (7) обозначим

$$A = (D_{ki} + \rho U_{ki}), \tag{15}$$

$$S = (-S_{ki}); \tag{16}$$

получаем матричное уравнение

$$Az = \lambda Sz, \tag{17}$$

которое представляет из себя обобщенную задачу на собственные значения, и для ее решения в настоящее время известно много приемлемых приближенных методов вычисления и создано много эффективных и качественных стандартных подпрограмм для ЭВМ [6].

Программа решения уравнения (6) вариационным методом составлена на алгоритмическом языке Фортран для машины CDC-6500.

Матричные элементы для уравнения (7) вычисляются по ст. п/п SIMPS с точностью (относительной) $\varepsilon = 10^{-12}$.

Как видно из формул (12) и (13), базисные функции $\chi_i\ (\alpha, x)$, входящие в выражение для матричных элементов из (7), имеют вид либо (12) для $1 \le i \le N_1$, где основной вклад в поведение их дают многочлены Лагерра и для них есть зависимость от ρ, как параметра, либо (13), и тогда их величина зависит лишь от многочленов Гегенбауэра, где зависимости от ρ нет, что позволяет заранее подготовить на МЛ или МД (магнитном диске) значения D_{ki}, U_{ki}, S_{ki} и использовать их при вычислении термов задачи (6) для разных ρ и i.

Матрицы A, S в задаче (17) получаются действительными и симметричными. Для матриц порядка $N \times N$ для $N > 20$ при решении обобщенной задачи на собственные значения (17) мы использовали систему ст.п/п EQZQF, EQZTF, EQZVF из библиотеки ст.п/п IMSL [6].

Таблица 1. Зависимость значений термов $\varepsilon_{1,3}$ от числа пробных функций при $\rho = 1{,}0;\ 15{,}0$

N	N_1	$\varepsilon_1\ (\rho = 1)$	$\varepsilon_3\ (\rho = 1)$	$\varepsilon_1\ (\rho = 15)$	$\varepsilon_3\ (\rho = 15)$
9	3	–0,616902	28,517510	–1,002301	–0,226594
18	6	–0,617898	28,515989	–1,002323	–0,228423
28	3	–0,618222	28,515575	–1,002324	–0,228460
31	6	–0,618223	28,515575	–1,002325	–0,228471
Работа [5]		–0,616489	28,512459	–1,002229	–0,228376

Итак, в области $1 \le N_1 < N$ при $N \le 30$ и $N_1 \le 3$ время вычисления для одного ρ всех собственных значений и собственных векторов составляет на ЭВМ CDC-6500 порядка 3÷5′.

Таблица 2. Зависимость значений термов ε_n $(n = 1 \div 6)$ от гиперрадиуса при $N = 28$, $N_1 = 3$

n	$\rho = 1$	$\rho = 2$	$\rho = 3$	$\rho = 4$	$\rho = 5$	$\rho = 6$	$\rho = 9$	$\rho = 11$	$\rho = 13$	$\rho = 15$	$\rho = 40$*
1	–0,618222	–1,434439	–1,28137	–1,14743	–1,06985	–1,03272	–1,00738	–1,00453	–1,00324	–1,00232	–1,000314
2	12,711505	2,293963	0,582759	0,029036	–0,225862	–0,338728	–0,37055	–0,341595	–0,314653	–0,294256	–0,254181
3	28,515575	5,196111	1,449241	0,373695	0,017946	–0,114793	–0,216092	–0,225643	–0,227313	–0,228460	–0,246185
4	33,208202	7,575808	3,029210	1,504103	0,827403	0,474516	0,05175	–0,058932	–0,121528	–0,153973	–0,124009
5	58,637775	13,296521	5,293571	2,625230	1,450701	0,845189	0,149556	–0,006621	–0,080065	–0,113365	–0,112200
6	61,522242	14,742855	6,258187	3,346295	2,018786	1,265826	0,279009	0,086455	0,004877	–0,034485	–0,097518

* Расчет выполнен для $N = 28$, $N_1 = 6$

Работа с программой показала, что точность вычисления матричных элементов может оказаться более существенной, чем увеличение числа (базисных) функций, и во-вторых, как и следовало ожидать, с уменьшением ρ надо уменьшать число функций, имеющих вид полиномов Лагерра.

Ниже мы приводим в таблицах 1,2 результаты счета. С увеличением числа пробных функций наблюдается довольно быстрая сходимость, обеспечивающая уже при $N \sim 30$ не менее пяти значащих цифр для нижних термов. Сравнение термов с результатами работ [3], [4], [5] показывает, что вариационная процедура обеспечивает лучшую точность вычисления нижнего терма. В то же время для высших термов точность расчета уменьшается, что является характерным для вариационного метода.

ЛИТЕРАТУРА

1. Macek J.H. — J. Phys., 1968, B1, p.831.
2. Fano U. — Rep. Progr. Phys., 1983, 46, p.97.
3. Абрашкевич А.Г. и др. — Препринт ОИЯИ, P4-88-640, Дубна, 1988.
4. Абрашкевич А.Г. и др. — Препринт ОИЯИ P4-89-311, Дубна, 1989.
5. Abrashkevich A.G. et al. — J. Phys., 1991, B24, p.1615.
6. IMSL LCD-0007, Library contents document, Houston, Texas, 1979, January.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 июля 1992 года.

Беляев В.Б., Картавцев О.И., Кочкин В.И. P4-92-297

Вариационный расчет термов для системы H^-

Предложен и реализован вариационный метод расчета собственных функций и собственных значений уравнения для поверхностных функций, возникающего при описании двухэлектронного атома в гиперсферических координатах. Использован анзац для вариационных функций, учитывающий известное асимптотическое поведение решения при малых и больших значениях гиперрадиуса.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации и Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1992

Перевод автора

Belyaev V.B., Kartavtsev O.I., Kochkin V.I. P4-92-297

Variational Calculation of the Eigenpotential for H^--System

The variational approach is applied for the calculation of the eigenfunctions and eigenvalues of the "surface" function equation, arising in the solution of the two-electron atom problem in hyperspherical variables. The variational ansatz matches with the asymptotic behaviour at small and large values of the hyperradius.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1992