

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

11-2002-209

На правах рукописи

УДК 681.3.06

51-72:539.172.17

519.615.5

ЧУЛУУНБААТАР

Очбадрах

**НЬЮТОНОВСКИЕ
ВАРИАЦИОННО-ИТЕРАЦИОННЫЕ СХЕМЫ
ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ
ТРЕХЧАСТИЧНЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ**

**Специальность: 05.13.18 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ**

**Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук**

Дубна 2002

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий Объединённого института ядерных исследований.

Научные руководители:

доктор физико-математических наук,
профессор

Игорь Викторович Пузынин

доктор физико-математических наук,
профессор

Сергей Ильич Веницкий

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
профессор

Леонид Антонович Севастьянов

кандидат физико-математических наук

Василий Вениаминович Пупышев

Ведущая организация:

Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова

Защита диссертации состоится " _____ " " _____ " 2002 г. в " _____ " часов на заседании диссертационного совета Д720.001.04. в Объединённом институте ядерных исследований, г. Дубна 141980, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Автореферат разослан " _____ " " _____ " 2002 г.

Учёный секретарь совета

кандидат физико-математических наук,
доцент



З.М. Иванченко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Задача трех квантовых частиц представляет классическую проблему и используется в качестве модели для описания физических процессов в различных областях: мезокатализ, захват антипротонов в смеси атомов гелия и молекул водорода, ионизация атомов гелия быстрыми электронами и протонами, фрагментация ядер и т.д. Теоретические подходы для изучения этих процессов тесно связаны с компьютерным моделированием. Вычисление с заданной точностью энергий и волновых функций атома гелия и гелиеподобных атомов, сечений реакций ионизации ($e, 2e$) и ($e, 3e$) атома гелия быстрыми электронами, а также исследование реакций простого захвата протона $p + He \rightarrow H + He^+$ и захвата протона с ионизацией атома гелия $p + He \rightarrow H + He^{++} + e$ являются актуальными задачами для интерпретации новых экспериментов по лазерной и электронной спектроскопии в современной атомной физике. Разработка устойчивых и эффективных методов численного анализа задачи трех квантовых частиц - одна из фундаментальных проблем математического моделирования широкого класса физических процессов.

В ядерной физике для корректного решения задачи нескольких частиц с короткодействующими парными взаимодействиями широко используется методы биполярных и гиперсферических гармоник и поверхностных однопараметрических функций. В этих подходах исходная задача редуцируется методом Галеркина или Канторовича к спектральным задачам для систем интегродифференциальных или обыкновенных дифференциальных уравнений с гиперрадиусом в качестве независимой переменной. Особый интерес вызывают задачи с сингулярными взаимодействиями, например, центробежными взаимодействиями, взаимодействиями нулевого радиуса в виде δ - функций, и задачи с граничными условиями третьего рода. Дело в том, что дифференциальная постановка таких задач вызывает трудности. Чтобы их избежать используется формулировка задачи в виде системы интегральных уравнений, в которой все трудности преодолеваются выбором подходящего параметрического базиса и аппроксимацией алгебраической задачей с полностью заполненными матрицами. Поэтому актуальной задачей является разработка устойчивых итерационных схем и алгоритмов решения спектральных задач для систем фредгольмовых интегральных уравнений.

Указанные задачи имеют единообразную постановку в рамках различных вариационных принципов Рэля-Ритца, Хюльгена, Швингера, а также проекционных методов Галеркина и Канторовича. Для решения квантовой задачи нескольких частиц с короткодействующими парными потенциалами используется вариационный функционал Швингера, на основе которого разработаны различные итерационные схемы. В ряде случаев такие схемы для многоканальной задачи рассеяния не обеспечивают устойчивого вычисления необходимых физических

параметров¹. Для решения подобных спектральных задач широкое применение получил непрерывный аналог метода Ньютона (НАМН), являющийся основой для построения устойчивых и эффективных итерационных схем^{2,3,4}. В рамках формулировки задачи на связанные состояния и задачи рассеяния как сингулярной задачи на собственные значения с некоторым дополнительным нелинейным вариационным функционалом возможно единообразное построение ньютоновских итерационных схем. Поэтому разработка устойчивых вариационно-итерационных схем, полученных с помощью НАМН, на основе объединения вариационных принципов и проекционных методов является актуальной проблемой численного моделирования квантовомеханических трехчастичных систем.

Цель работы. Построение и реализация вариационно-итерационных алгоритмов для решения с заданной точностью: задачи рассеяния трех квантовых частиц с короткодействующими взаимодействиями в гиперсферическом и адиабатическом представлениях и задачи на связанные трехчастичные состояния в случае парных кулоновских потенциалов. Анализ и апробация разработанных алгоритмов на известных точно решаемых задачах и интегрируемых моделях трех квантовых частиц. Вычисление с прецизионной точностью энергий и волновых функций основного состояния атома гелия и гелиеподобных атомов нерелятивистском приближении. Расчет сечений реакций ионизации атома гелия быстрыми электронами и протонами в импульсном приближении.

Научная новизна работы и значимость ее результатов. На основе вариационного функционала Швингера и метода разложения Канторовича, дана формулировка задачи рассеяния и задачи на связанные состояния для трех квантовых частиц с короткодействующими парными потенциалами в виде многоканальной спектральной задачи на собственные значения для систем связанных фредгольмовых интегральных уравнений.

Разработаны новые устойчивые ньютоновские вариационно-итерационные схемы и алгоритмы решения с заданной точностью спектральных задач для систем связанных фредгольмовых интегральных уравнений.

Исследована сходимость адиабатического разложения в методе Канторовича и эффективность предложенных итерационных схем для двумерной интегрируемой модели трех тождественных частиц на прямой с парными притягивающими или отталкивающими потенциалами нулевого радиуса ниже трехчастичного порога и в окрестности выше трехчастичного порога.

Построен новый однопараметрический базис факторизованных коррелированных вариационных функций для расчета связанных состояний гелиеподобных атомов в нерелятивистском приближении. Получены новые более точные верхние оценки основного состояния изоэлектронных атомов гелия и некоторых изотопов этого атома.

¹Зубарев А.Л. Вариационный принцип Швингера в квантовой механике. М.: 1981.

²Гавурин М.К., Изв. вузов, 1958, Т. 5, с. 18.

³Жидков Е.П., и др, ЭЧАЯ, 1973, Т. 4, с. 127.

⁴Пузынин И.В., и др, ЭЧАЯ, 1999, Т. 30, с. 210.

Создана программа, позволяющая воспроизводить на персональном компьютере табличные значения новой двенадцатикомпонентной однопараметрической вариационной функции основного состояния атома гелия, необходимой для расчетов процессов ионизации. Эффективность выбранной параметризации продемонстрирована сравнением вычисленных сечений с известными экспериментальными данными и результатами, полученными с помощью многопараметрических вариационных функций.

Программное обеспечение написано на языке Фортран с двойной и четверной точностью, что дает возможность присоединять к нему различные модули пользовательских программ. Тексты разработанных программ доступны, их блок-схемы и программа для двенадцати компонентной функции основного состояния атома гелия приведены в приложении диссертации.

Разработанные в диссертации подходы, итерационные схемы и алгоритмы могут быть применены для расчета характеристик квантовых трехчастичных систем в рамках краевых задач для уравнения Шредингера. При этом исходная задача сводится к спектральной задаче для системы связанных фредгольмовых интегральных уравнений (с помощью гиперсферических гармоник или поверхностных однопараметрических функций) или к спектральной алгебраической задаче (с помощью вариационных функций).

Апробация. Материалы диссертации докладывались на семинарах Лаборатории информационных технологий и Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова ОИЯИ, на семинарах института математики Монгольского государственного университета, а также на следующих конференциях: "The 2nd Int. Conf. Modern Trends on Computational Physics", Dubna, Russia, July 2-6, 2000, "Int. Conf. On Mathematics", UlaanBaatar, Mongolia, August 26-September 3, 2001, "Int. Conf. On Laser Physics and Photons, Spectroscopy and Molecular Modeling", Saratov, Russia, October 2-6, 2001, "Int. Conf. On electron and photon impact ionization and related topics", Metz, France, July 18-20, 2002, "Int. Workshop and Seminar On Microscopic Chaos and Transport in Many-Particle Systems", Berlin, Germany, August 12-25, 2002.

Основное содержание диссертации отражено в 10 публикациях в виде статей в журналах Journal of Physics A. Mathematical and General, Journal of Physics B. Atomic and Molecular Physics, Journal of Computational methods in Sciences and Engineering и Proceedings of SPIE (The International Society for Optical Engineering), Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики, в препринтах и сообщениях ОИЯИ.

Объем и структура работы. Диссертация изложена на 140 страницах, включая 81 рисунок и 19 таблиц, и состоит из введения, четырех глав, четырех приложений и списка литературы из 95 наименований.

Личный вклад автора. Автор диссертации, работая в коллективе соавторов, объединяющем сотрудников ЛИТ и ЛТФ ОИЯИ, НИИЯФ МГУ, Университета Темпл США, Университета Метц Франция, самостоятельно разработал все алгоритмы и программы, представленные в диссертации (кроме программы

формирования потенциалов в адиабатическом представлении для модели трех тождественных частиц на прямой с потенциалами нулевого радиуса, адаптированной в виде входного модуля подпрограммы пользователя) и внес определяющий вклад в разработку представленных математических моделей и компьютерное моделирование конкретных физических задач и анализ результатов.

Основное содержание работы.

Во **Введении** показана актуальность проблемы, сформулирована цель и основные результаты диссертационной работы.

В **первой главе** построены новые ньютоновские вариационно-итерационные схемы и алгоритмы решения с заданной точностью спектральной задачи для уравнения Фредгольма. Эти алгоритмы апробированы на известных точно решаемых моделях задачи рассеяния для радиального уравнения Шредингера.

В разделе 1.1 спектральная задача рассматривается как нелинейное уравнение при фиксированном значении некоторого параметра $k \in \mathcal{R}_+^1$

$$\varphi(z) = 0 \quad (1)$$

относительно пары неизвестных $z = (\lambda, \Psi) \in \mathcal{R} \otimes \mathcal{Y}, \mathcal{Y} \subseteq \mathcal{B}$. Представлены общие положения, необходимые для построения устойчивых итерационных схем решения спектральных задач на основе НАМН. Показана возможность вывода различных известных итерационных схем для решения спектральных задач на единой основе НАМН и его модификаций (в разделе 1.4)

$$\begin{aligned} \varphi'(z_n)\Delta z_n &= -\varphi(z_n), \\ z_{n+1} &= z_n + \tau_n \Delta z_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (2)$$

где φ' - производная Фреше и z_0 - элемент в окрестности искомого решения z^* . Специальным выбором параметра τ_n оптимизируется скорость и устойчивость сходимости $z_n \rightarrow z^*$.

В разделе 1.2 рассматривается задача рассеяния для квантовомеханических систем в рамках радиального уравнения Шредингера на полуоси $\rho \in (0, \infty)$ с короткодействующим центрально-симметричным потенциалом $V(\rho)$ в n мерном пространстве при заданных импульсе $k \geq 0$ и орбитальном моменте l

$$\left(\frac{1}{\rho^{n-1}} \frac{d}{d\rho} \rho^{n-1} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+n-2)}{\rho^2} + k^2 \right) \Psi_l(\rho) = V(\rho) \Psi_l(\rho). \quad (3)$$

Для уравнения (3) соответствующие граничные условия получаются переносом асимптотических условий для волновых функций из сингулярной области $[0, \infty)$

$$\Psi_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \rho^l; \quad \Psi_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} C \rho^{-\nu} \sin(k\rho - \pi(l + \nu - 1)/2 + \delta_l), \quad (4)$$

в конечную область интегрирования $\rho \in [\rho_{min}, \rho_{max}]$, где $\nu = (n - 1)/2$, δ_l - искомый фазовый сдвиг, а C - нормировочный коэффициент. В одномерном пространстве ($n = 1$) задача (3) рассматривается на всей оси $(-\infty, \infty)$ и для потенциалов с асимптотикой $V(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \pm\infty} \exp(\pm\rho)$ вместо условий (4) используются условия

$$\Psi(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow -\infty} 0; \quad \Psi(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} C \sin(k\rho + \delta). \quad (5)$$

Краевая задача (3), (4) сводятся к спектральной задаче для уравнения Фредгольма:

$$A_l(\rho, \rho')\Psi_l(\rho') = \lambda_l B_l(\rho, \rho')\Psi_l(\rho'), \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} A_l(\rho, \rho')\Psi_l(\rho') &= \Psi_l(\rho) - \int_0^\infty G_l(\rho, \rho')V(\rho')\Psi_l(\rho')\rho'^{n-1}d\rho', \\ B_l(\rho, \rho')\Psi_l(\rho') &= y_l(\rho) \int_0^\infty y_l(\rho')V(\rho')\Psi_l(\rho')\rho'^{n-1}d\rho', \end{aligned} \quad (7)$$

$\lambda_l = -\pi \text{ctg} \delta_l / 2$ - искомый спектральный параметр, а зависимость от нормировочного коэффициента C в асимптотике неизвестной волновой функции $\Psi_l(\rho)$ исключена. Функция $y_l(\rho)$ и свободная функция Грина $G_l(\rho, \rho')$ определяются через регулярные и нерегулярные в точке $\rho = 0$ решения уравнения (3) при $V(\rho) \equiv 0$. Функция $y_l(\rho)$ имеет вид

$$y_l(\rho) \equiv \rho^{-\mu} J_{l+\mu}(k\rho), \quad \mu = n/2 - 1, \quad n > 1, \quad (8)$$

где J_i - функция Бесселя первого рода. В случае $n = 1$ дано специальное построение функции Грина. Для решения задачи (6), (7) используется дополнительное условие

$$(V(\rho)\Psi_l(\rho), (A_l(\rho, \rho') - \lambda_l B_l(\rho, \rho'))\Psi_l(\rho')) = 0, \quad (9)$$

следствием которого является вариационный функционал Швингера

$$\lambda_l = \frac{(V(\rho)\Psi_l(\rho), A_l(\rho, \rho')\Psi_l(\rho'))}{(V(\rho)\Psi_l(\rho), B_l(\rho, \rho')\Psi_l(\rho'))}, \quad (10)$$

где $(f, g) = \int_0^\infty f^* g \rho^{n-1} d\rho$. В результате интегральному уравнению (6) сопоставляется функционал, устойчивый относительно вариаций первого порядка по Ψ_l , и задача рассеяния (3), (4) формулируется как задача на собственные значения (1) относительно пары неизвестных $z = (\lambda_l, \Psi_l)$: функции фазового сдвига λ_l и волновой функции Ψ_l . Дискретизация задачи (6), (9) на сетке узлов $\Omega_h \in [\rho_{\min}, \rho_{\max}]$ (с использованием известных квадратурных формул Боде) приводит к алгебраической обобщенной задаче на собственные значения

$$\varphi(z) = \begin{pmatrix} (A - \lambda B)\Psi, \\ (V\Psi, (A - \lambda B)\Psi) \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (11)$$

Далее, в соответствии с (2) строится новая итерационная схема для нахождения приближений λ_{n+1} , Ψ_{n+1} с помощью поправок v_n , u_n и μ_n :

$$\begin{cases} v_n = -\Psi_n, \\ (A - \lambda_n B)u_n = B\Psi_n, \\ \mu_n = \frac{(\Psi_n V, A\Psi_n)}{(\Psi_n V, B\Psi_n)} - \lambda_n, \\ \Psi_{n+1} = \Psi_n + \tau_n(v_n + u_n \mu_n), \\ \lambda_{n+1} = \lambda_n + \tau_n \mu_n, \end{cases} \quad (12)$$

где $\{\lambda_0, \Psi_0\}$ - начальное приближение из окрестности искомого решения, а для выбора итерационного шага τ_n , $n = 0, 1, 2, \dots$, используется способ, основанный на минимизации невязки. Выражение для μ_n совпадает с вариационным функционалом Швингера (10).

В разделе 1.3 сходимость предложенной итерационной схемы продемонстрирована для задачи упругого рассеяния (3)-(5) с потенциалом Морзе ($n = 1$), Вудса-Саксона и потенциалом сферической ямы ($n = 3$). Схема имеет второй порядок точности по шагу h равномерной сетки Ω_h , поскольку первая производная по аргументу ρ функции Грина $G_l(\rho, \rho')$ терпит разрыв первого рода при $\rho = \rho'$. В этой схеме фазовый сдвиг δ вычислен с шестью верными знаками.

В разделе 1.5 показано, что использование в окрестности точки ρ_{min} асимптотики $\Psi(\rho)$ для аппроксимации решений, позволяет построить схемы повышенного порядка точности для вычисления фазового сдвига δ . Эффективность реализации такой схемы вычислений шестого порядка точности по шагу h равномерной сетки Ω_h продемонстрирована расчетом фазового сдвига δ с двенадцатью верными цифрами для одномерной задачи рассеяния с потенциалом Морзе.

Соответствующие алгоритмы реализованы в виде программы на языке Фортран в представлении вещественных чисел с двойной точностью.

Во второй главе рассматриваются задача рассеяния и задача на связанные состояния для системы N - радиальных уравнений Шредингера на полуоси $\rho \in (0, \infty)$

$$\left(I \frac{1}{\rho^m} \frac{d}{d\rho} \rho^m \frac{d}{d\rho} + Q(\rho, \gamma) \frac{d}{d\rho} + \frac{1}{\rho^m} \frac{d}{d\rho} \rho^m Q(\rho, \gamma) + U(\rho, \gamma) + 2E(\gamma)I \right) \Psi(\rho) = 0. \quad (13)$$

Здесь I - единичная матрица, $m = n - 1$, $Q(\rho, \gamma)$, $U(\rho, \gamma) \equiv H(\rho, \gamma) + \alpha(\rho)\rho^{-2}$ - заданные матрицы потенциалов взаимодействия, $\alpha(\rho)\rho^{-2} < 0$ - диагональная матрица эффективных центробежных потенциалов размерностью $N \times N$, а $E(\gamma)$ - спектральный параметр, зависящий от некоторых физических параметров γ (см. раздел 2.1 диссертации). Для уравнения (13) граничные условия получаются переносом асимптотических условий для волновых функций из сингулярной области $[0, \infty)$

$$l_1(\rho, a, \Psi(\rho, \gamma)) = 0, \rho = 0; \quad l_2(\rho, b, \Psi(\rho, \gamma)) = 0, \rho = \infty, \quad (14)$$

в конечную область интегрирования $\rho \in [\rho_{min}, \rho_{max}]$. Матрицы l_1, l_2 в граничных условиях (14) нелинейно зависят от векторов-параметров a и b , в число компонент которых входят в задаче на связанные состояния неизвестный спектральный параметр, т.е. энергия связи системы $\epsilon = -2EI - \text{diag}(U(\infty)) > 0$, а в задаче рассеяния неизвестные элементы S - матрицы или матрицы реакции $R = i(I - S)(I + S)^{-1}$ при данном импульсе столкновения $q^2 = 2EI + \text{diag}(U(\infty)) > 0$ (см. раздел 2.2). В задаче на связанные состояния требуется определить собственные значения $E = -k^2/2 < 0$ и соответствующие собственные функции $\Psi(\rho, \gamma)$, а в задаче рассеяния при заданном значении энергии E необходимо

найти S - или R - матрицы (в представлениях собственных фазовых сдвигов δ) и волновые функции рассеяния $\Psi(\rho, \gamma)$.

В разделе 2.1 задачи (13), (14) сводятся к нелинейному уравнению (1) относительно неизвестного элемента z . В задаче на связанные состояния $z = (k, \Psi)$, а в задаче рассеяния $z = (R, \Psi)$ при фиксированном значении E . Краевая задача (13), (14) сводится к матричной спектральной задаче для уравнения (6) с дополнительным условием (9), в котором

$$\begin{aligned} A(\rho, \rho')\Psi(\rho') &= \Psi(\rho) - \int_0^\infty G(\rho, \rho')V(\rho')\Psi(\rho')\rho^{m-1}d\rho', \\ B(\rho, \rho')\Psi(\rho') &= Y(\rho) \int_0^\infty Y(\rho')\text{diag}V(\rho')\Psi(\rho')\rho^{m-1}d\rho', \end{aligned} \quad (15)$$

$$V(\rho)\Psi(\rho) = - \left(Q(\rho)\frac{d}{d\rho} + \frac{1}{\rho^m}\frac{d}{d\rho}\rho^m Q(\rho) + U(\rho) - \frac{\alpha(0)}{\rho^2} - \text{diag}U(\infty) \right) \Psi(\rho), \quad (16)$$

где $V(\rho)\Psi(\rho)$ - матрица размерностью $N \times N$ действия эффективных потенциалов $V(\rho)$ на матрицу решений $\Psi(\rho)$. Диагональные матрицы $Y(\rho)$ и свободная функция Грина $G(\rho, \rho')$ определяются через регулярные и нерегулярные в точке $\rho = 0$ решения следующего уравнения

$$\left(I \frac{1}{\rho^m} \frac{d}{d\rho} \rho^m \frac{d}{d\rho} + \frac{\alpha(0)}{\rho^2} + \text{diag}(U(\infty)) + 2EI \right) Y(\rho) = 0. \quad (17)$$

В такой формулировке вариационный функционал Швингера (10) используется для определения диагональных элементов λ обратной матрицы реакции $W = R^{-1}$. При этом недиагональные элементы R матрицы вычислялись по найденным решениям $\Psi(\rho)$ с помощью известного интегрального соотношения

$$R = \int_0^\infty Y(\rho)V(\rho)\Psi(\rho)\rho^{n-1}d\rho. \quad (18)$$

Собственные фазовые сдвиги δ определялись решением алгебраической задачи на собственные значения

$$RC = C\Lambda, \quad \Lambda = \text{diag}(\text{tg}\delta). \quad (19)$$

Для численного решения соответствующей алгебраической задачи (11), как нелинейного уравнения (1) относительно пары неизвестных $z = (\lambda, \Psi)$, были использовано матричное обобщение итерационной схемы (12).

Соответствующие алгоритмы реализованы в виде программы на языке Фортран в представлении вещественных чисел с двойной точностью.

В задаче на связанные состояния (13), (14) собственные функции $\Psi(\rho)$ удовлетворяют условию нормировки

$$(\Psi(\rho), \Psi(\rho)) = \int_0^\infty \Psi^2(\rho)\rho^{n-1}d\rho = 1, \quad (20)$$

поэтому имеет место интегральное уравнение относительно пары неизвестных $z = (k, \Psi)$

$$(I - D(k))\Psi(\rho') = \Psi(\rho) - \int_0^{\infty} G(k, \rho, \rho')V(\rho')\Psi(\rho')\rho^{n-1}d\rho' = 0. \quad (21)$$

Для решения нелинейной однородной задачи (21) вместо (9) использовался дополнительный вариационный функционал

$$(V(\rho)\Psi(\rho), (I - D(k))\Psi(\rho')) = 0. \quad (22)$$

Дискретизация задачи (21), (22) на сетке $\Omega_h \in [\rho_{min}, \rho_{max}]$ порождает нелинейную обобщенную алгебраическую задачу на собственные значения

$$\varphi(z) = \begin{pmatrix} (I - D(k))\Psi, \\ (V\Psi, (I - D(k))\Psi) \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (23)$$

Далее по формулам (2) строилась новая итерационная схема для нахождения приближений k_{n+1} , Ψ_{n+1} с помощью поправок v_n , u_n и μ_n :

$$\begin{cases} v_n = -\Psi_n, \\ (I - D)u_n = D'_k \Psi_n, \\ \mu_n = \frac{(V\Psi_n, (I - D)\Psi_n)}{(V\Psi_n, D'_k \Psi_n)}, \\ \Psi_{n+1} = \Psi_n + \tau_n(v_n + u_n\mu_n), \\ k_{n+1} = k_n + \tau_n\mu_n, \end{cases} \quad (24)$$

где $\{k_0, \Psi_0\}$ - начальное приближение из окрестности искомого решения. Штрих обозначает производную по k , искомая энергия определяется по формуле $E_n = -k_n^2/2$. Для выбора итерационного шага τ_n , $n = 0, 1, 2, \dots$, использовались способ, основанный на минимизации невязки. Для экономии оперативной памяти ЭВМ при реализации алгоритма (24) применялась итерационная схема, не требующая обращения матриц

$$\begin{cases} (V\Psi_m, \Psi_m) = (V\Psi_m, D_{m+1}\Psi_m), \quad D_{m+1} \equiv D(k_{m+1}), \\ \Psi_{m+1} = D_{m+1}\Psi_m, \quad m = 0, 1, 2, \dots \end{cases} \quad (25)$$

Соответствующие алгоритмы реализованы в виде программы на языке Фортран в представлении вещественных чисел с двойной точностью.

В разделе 2.2 анализ и апробация разработанных алгоритмов продемонстрированы на интегрируемых моделях трех тождественных частиц на прямой с потенциалами нулевого радиуса, поскольку здесь известны энергия связанного состояния E и матрица рассеяния S . Выполненное исследование исходной двумерной задачи путем редукции к задаче (13), (14) имеет самостоятельное значение с точки зрения теоретического и численного анализа.

Для рассматриваемой модели уравнение Шредингера в полярных координатах ρ и θ для парциальной волновой функции $\Psi_i(\rho, \theta)$ имеет вид⁵

$$\left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - h_\rho + 2E \right] \Psi_i(\rho, \theta) = 0, \quad \rho \in \mathcal{R}_+^1. \quad (26)$$

Здесь Ψ_i - искомая волновая функция, E - энергия в системе центра масс ($\hbar = m = 1$), h_ρ - параметрический гамильтониан при каждом фиксированном значении ρ :

$$h_\rho = -\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{2c\bar{\kappa}}{\rho} \sum_{n=0}^5 \delta(\theta - \theta_n), \quad \theta_n = \frac{n\pi}{3} + \frac{\pi}{6}, \quad (27)$$

где $\bar{\kappa} = \pi/6$, $c = -1$ соответствует притяжению двух частиц, а $c = 1$ - отталкиванию. Полный ортогональный набор собственных функций $B_j(\rho, \theta) \in \mathcal{W}_2^1(S^1)$ и собственных значений $\epsilon_j(\rho)$ гамильтониана (27) образуют при каждом фиксированном значении ρ решения краевой задачи

$$\begin{cases} -\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} B_j(\rho, \theta) = \epsilon_j(\rho) B_j(\rho, \theta), \\ \left. \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} B_j(\rho, \theta) \right|_{\theta=\theta_n^\pm} = \mp c\bar{\kappa} B_j(\rho, \theta_n^\pm), \quad \theta_n^\pm = \pm \frac{\pi}{6} + \frac{n\pi}{3}. \end{cases} \quad (28)$$

Полная волновая функция $\hat{\Psi}$ ищется в виде разложения Канторовича по ортогональному набору поверхностных однопараметрических функций $B_j(\rho, \theta)$ и $B_j^{as}(\theta) = B_j(\rho \rightarrow \infty, \theta)$:

$$\hat{\Psi} = \sum_{i=0}^N |\Psi_i\rangle \langle B_i^{as}|, \quad |\Psi_i\rangle = \sum_{j=0}^N |B_j\rangle \langle B_j|\Psi_i\rangle = \sum_{j=0}^N B_j(\rho, \theta) \chi_{ji}(\rho). \quad (29)$$

В результате усреднения уравнения (26) по базису $B_j(\rho, \theta)$ методом Канторовича получается система из N обыкновенных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами (13) при $n = 2$ на полуоси \mathcal{R}_+^1 . Асимптотические граничные условия (14) по радиальной переменной зависят от типа физических процессов. Например, выше трехчастичного порога ($E > 0$) $\rho \rightarrow \infty$

$$\begin{cases} \chi_{0i}^{as}(\rho) \rightarrow (-Y_{1/2}(q\rho)\delta_{0i} + J_{1/2}(q\rho)W_{0i}), \\ \chi_{ji}^{as}(\rho) \rightarrow (J_{6j-3}(k\rho)\delta_{ji} + Y_{6j-3}(k\rho)W_{ji}), \\ \chi_{ji}^{as}(\rho) \rightarrow (J_{6j+3}(k\rho)\delta_{ji} + Y_{6j+3}(k\rho)W_{ji}), \end{cases} \quad \text{при } c=-1, \quad (30)$$

где $q = \sqrt{\pi^2/36 + k^2}$, $2E = k^2$, а J_i и Y_i - функции Бесселя и Неймана первого рода, $W_{ji} = R_{ji}^{-1}$ - элементы обратной матрицы реакции. Соответствующая двумерная задача рассеяния для уравнения (26) в представлении поверхностных однопараметрических функций (29) формулируется как многоканальная спектральная задача (1) относительно пары неизвестных $z = (R, \Psi)$ для системы

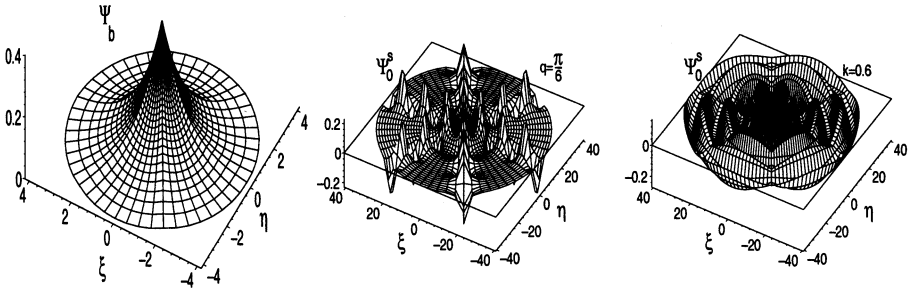


Рис. 1. Волновая функции основного состояния Ψ_b при $2E_b \approx -\pi^2/9$. Волновые функции рассеяния Ψ_0^s при $q = \pi/6$ (при трехчастичной пороговой энергии $2E = -k^2 = 0$) для притягивающих парных потенциалов ($c = -1$) и при $k = 0.6$ для отталкивающих парных потенциалов ($c = 1$)

Таблица. Сравнение скорости сходимости разложений Канторовича (29) и Галеркина (31) на примере расчета энергии $E(N)$ связанного трехчастичного состояния: N - число уравнений, $\Delta E(N) = E(N) - E^{exact}$ - разности вычисленного $E(N)$ методом Канторовича (К) и Галеркина (Г) и точного E^{exact} значений энергии.

N	ΔE^K	ΔE^Γ
1	1.801(-4)	9.662(-2)
2	2.762(-6)	4.116(-2)
3	2.697(-7)	2.573(-2)
4	5.413(-8)	1.866(-2)
5	1.594(-8)	1.462(-2)
6	5.949(-9)	1.201(-2)

одномерных интегральных уравнений (6) с матричными операторами (15), (16) и дополнительного вариационного функционала Швингера (9). Сходимость разложения (29) в методе Канторовича и эффективность предложенных итерационных схем (12), (24), (25) продемонстрирована для рассматриваемой модели ниже трехчастичного порога ($E < 0$) и в окрестности выше трехчастичного порога ($E > 0$). Как видно из Рис. 1 волновые функции имеют максимумы для притяжения ($c = -1$) и минимумы отталкивания ($c = 1$) на границах шести секторов круга, где первые и вторые производные решения терпят скачок. Вычислены элементы R матрицы ниже трех частичного порога и в окрестности выше трехчастичного порога с четырьмя и тремя верными цифрами, соответственно, в случае $N = 6$. Проведено сравнение с аналитическими результатами.

⁵Amaya-Tapia A., Larsen S.Y., Popiel J.J., Few-Body Systems, 1997, V. 23, p. 87.

На примере расчета энергии $E(N)$ связанного трехчастичного состояния для этой модели в таблице, представлено сравнение скорости сходимости разложения Канторовича (29) и Галеркина

$$\Psi_i(\rho, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \bar{\chi}_0(\rho) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^N \bar{\chi}_j(\rho) \cos(6j\theta). \quad (31)$$

Медленная скорость сходимости значений энергии $\Delta E^\Gamma(N)$ при увеличении числа N базисных функций (31) объясняется тем, что ослабить достаточные условия сходимости классического метода Галеркина здесь нельзя.

В третьей главе построен и исследован новый однопараметрический базис факторизованных коррелированных вариационных функций, необходимых для расчетов с заданной точностью энергии и волновых функций связанных состояний гелиеподобных атомов. Эта задача, в отличие от кулоновской задачи двух тел, не имеет точного аналитического решения, но является базовой трехчастичной системой для прецизионных расчетов и экспериментов в атомной физике. Для вычисления энергии связанных состояний используется вариационный принцип Рэлея-Ритца и подходящий набор параметрических пробных функций в координатном представлении. Верхняя оценка энергии атома гелия в основном состоянии $E = -2.903\,724\,377\,032$ а.е. в нерелятивистском приближении для бесконечной массы ядра была получена еще в 1966 г.⁶ Недавно для энергии этого состояния были получены лучшие оценки: $E = -2.903\,724\,377\,034\,119\,593$ а.е.⁷ и $E = -2.903\,724\,377\,034\,119\,597$ а.е.⁸

Для явного учета корреляции двух электронов в атоме, находящихся на расстоянии r_{12} друга от друга и на расстояниях r_1 и r_2 от ядра атома в вариационных расчетах используют периметрические координаты⁶ r_1, r_2, r_{12} . В этих координатах радиальная часть элемента объема интегрирования не сводится к простому произведению одномерных интегралов, поэтому для перехода к факторизованному коррелированному представлению необходимо использовать специальные проективные координаты.

В разделе 3.1 сформулирован альтернативный вариант оптимизации вариационных вычислений, который обеспечивает более лучшую устойчивость и высокую точность вычисления значений энергии. В проективных координатах

$$s = r_1 + r_2, \quad v = \frac{r_{12}}{r_1 + r_2}, \quad w = \frac{r_1 - r_2}{r_{12}} \quad (32)$$

трехмерные интегралы, необходимые для редукции вариационной задачи к алгебраической, представляются в виде

$$I = \int_0^\infty s^5 ds \int_0^1 v^2 dv \int_0^1 F(s, v, w) (1 - v^2 w^2) dw. \quad (33)$$

⁶Frankowski K., Pekeris C.L., Phys. Rev., 1966, V. 146, p. 46; 1996, V. 150, p. 336.

⁷Goldman S.P., Phys. Rev. A, 1998, V. 57, p. R667.

⁸Drake G.W.F., Phys. Scr., 1999, V. 83, p. 83.

Основное преимущество такой постановки задачи достигается выбором факторизованного по всем трем аргументам (32) коррелированного представления для вариационных функций

$$\Psi = \sum_{n=0}^N C_n \psi_n, \quad \psi_n \equiv \psi_{ij,2k} = U_i(s) V_j(v) W_{2k}(w), \quad (34)$$

где $W_{2k}(w)$ - четные функции по w на сегменте $[-1,1]$ для основного S состояния гелиеподобных атомов. В результате элемент объема (33) сводится к произведению трех одномерных интегралов и поэтому все матричные элементы гамильтониана удалось вычислить явно. Далее полученная задача вариацией функционала Рэля-Ритца приводится к обобщенной задаче на собственные значения.

В разделе 3.2 для вычисления энергии использовалась ньютоновская итерационная схема, построенная на основе вариационного функционала Рэля-Ритца с функциями (34) в виде

$$U_i(s) = N_i e^{-\alpha s} L_i^5(2\alpha s), \quad V_j(v) = \bar{N}_j P_j^{(0,2)}(2v-1), \quad W_{2k}(w) = \hat{N}_{2k} P_{2k}^{(1,1)}(w), \quad (35)$$

где N_i , \bar{N}_j и \hat{N}_{2k} константы нормировки, L_i^5 - обобщенные полиномы Лагерра, $P_j^{(q,t)}$ - полиномы Якоби, а α - единственный вариационный параметр. В расчетах использовался ортонормированный базис U_i значения α определялись из условия $\partial E(\alpha)/\partial \alpha = 0$. В этом подходе получены новые верхние оценки основного состояния атома гелия с точностью до двадцати двух знаков: $E = -2.903\,724\,377\,034\,119\,598\,297$ а.е., а также новые оценки энергии для изотопов гелиевого атома $E(He^4) = -2.903\,304\,557\,733\,234\,397\,556$ а.е., $E(He^3) = -2.903\,167\,210\,703\,584\,120\,495$ а.е. и изоэлектронных состояний с зарядом $Z = 3, \dots, 10$.

Соответствующая программа написана на языке Фортран (FORTRAN77, FORTRAN90) в представлении вещественных чисел с двойной точностью (для получения до тринадцати верных знаков оценки энергии) и с четверной точностью (для получения до двадцати двух верных знаков оценки энергии).

В разделе 3.3 представлены результаты численного анализа скорости сходимости по номеру N в разложении решения (34) по однопараметрическому базису пробных функций (35). Выполнен независимый численный расчет и дано сравнение с неполностью факторизованным базисом в проективных координатах⁷

$$\bar{u} = r_>, \quad \bar{v} = \frac{r_<}{r_>}, \quad \bar{w} = \frac{r_{12} - r_>}{r_<}, \quad r_> = \max(r_1, r_2), \quad r_< = \min(r_1, r_2), \quad (36)$$

для которого граничные условия в точке парного соударения электронов определяются эффективным потенциалом в виде δ -функции, входящим непосредственно в гамильтониан задачи. В этих координатах радиальная базисная функция не представима произведением двух радиальных водородно-подобных функций

$$\exp(\alpha s) \equiv \exp(\alpha(r_1 + r_2)) = \exp(\alpha(r_> + r_<)) = \exp(\alpha \bar{u}(1 + \bar{v})), \quad (37)$$

т.е. не факторизуется до вида $f(\bar{u})g(\bar{v})$.

В четвертой главе исследованы модели процессов ионизации основного S состояния атома гелия быстрыми электронами и протонами в импульсном приближении. Изучены радиальные и угловые корреляции электронов с помощью известных вариационных функций: однокомпонентной функцией Хиллерааса (Ну), двенадцатипараметрической функцией Бонама и Коля (ВК) и двенадцатикомпонентной ($N = 12$) однопараметрической функции CPV (34), построенной в разделе 4.1 вариационным методом, описанным в третьей главе. Функция CPV адекватно учитывает корреляцию электронов в атоме и согласованна с лидирующим экспоненциальным членом (37) в асимптотическом разложении формального решения "точной" волновой функции мишени.

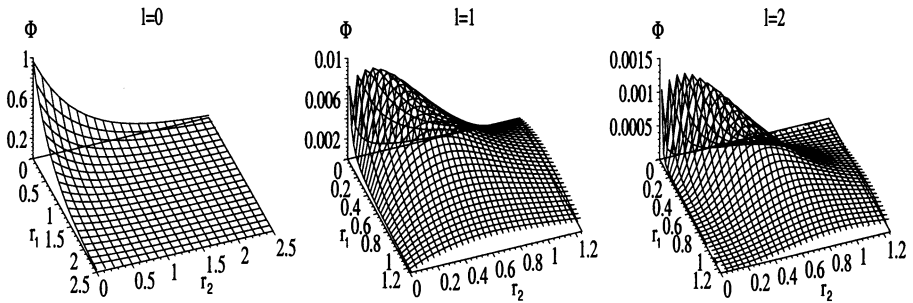


Рис. 2. Факторизованная двенадцатикомпонентная коррелированная вариационная функция Φ_l (CPV) [8] при орбитальных моментах электронов $l = 0, 1, 2$

В разделе 4.2 функция CPV при орбитальных моментах электронов $l = 0, 1, 2$ (см. Рис. 2) применяется в расчетах сечений процессов $(e, 2e)$ и $(e, 3e)$ ударной ионизации атома гелия. На Рис. 3 сравниваются расчеты $(e, 2e)$ и $(e, 3 - 1e)$ реакций выполненных с вариационными функциями CPV, Ну, ВК и экспериментальным (Exp) данными⁹ $(e, 2e)$. Как видно, теоретические сечения совпадают с экспериментальными при больших энергиях. На Рис. 3 также представлено сечение 4DCS $(e, 3 - 1e)$ реакции (в настоящее время проводятся эксперименты в данной области углов и энергий), подтверждающее существенное влияние радиальных корреляций, поскольку в этом случае функция $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ проектируется на собственную функцию непрерывного спектра иона He^+ , причем функции CPV и ВК дают практически совпадающие результаты.

В разделе 4.3 исследованы различные модели реакции захвата с ионизацией $p + He \rightarrow H + He^{++} + e$ при очень малых углах рассеяния водорода $\theta_p = (0.1 - 0.5)$ mrad и энергии протона $E_p = (0.15 - 1.4)$ МэВ, авторы недавних

⁹Giardini-Guidoni A. et al., in Coherence and Correlation in Atomic Collisions, 1979, p. 13.

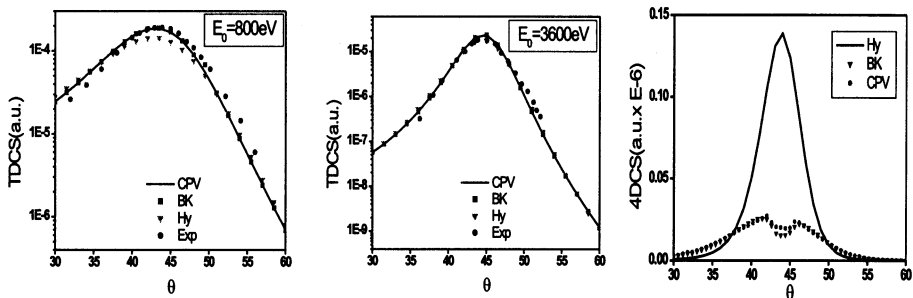


Рис. 3. Сравнения расчетов трехкратного TDCS и четырехкратного 4DCS дифференциального сечения для процесса $(e, 2e)$ и $(e, 3-1e)$. Для 4DCS при энергии налетающего электрона $E_0 = 3000$ эВ и энергии медленного инжектируемого электрона $E_k = 20$ эВ

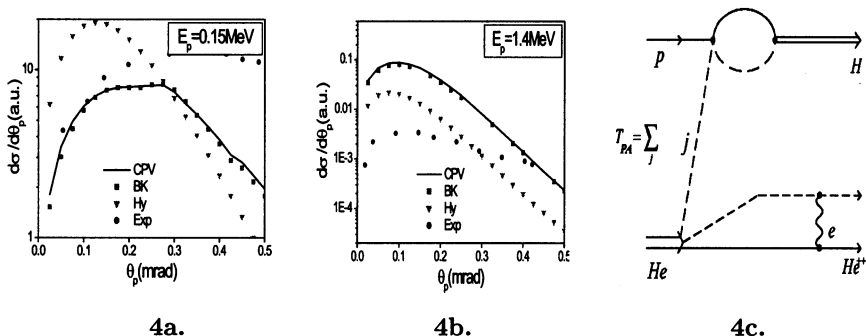


Рис. 4. Однократные дифференциальные сечения рассеяния для реакции захвата с ионизацией 4а, 4б, и диаграмма в полюсном приближении 4с

экспериментов^{10,11} предлагали использовать для получения новой информации о структуре волновой функции мишени в импульсном приближении. Этими авторами было высказано предположение, что при построении теоретической модели можно опустить требование резонансного захвата и рассматривать только полюсной механизм (см. Рис. 4с). Для проверки этого предположения и выявления роли корреляций электронов в такой модели на рисунках 4а, 4б представлены результаты наших расчетов однократных дифференциальных сечений $d\sigma/d\theta_p$ при $E_p = 0.15$ МэВ и $E_p = 1.4$ МэВ с тремя различными вариационными волновыми функциями (Hy, BK, CPV) основного состояния атома гелия.

¹⁰Mergel A., Ph.D. thesis, Univ. Frankfurt/Main, Shaker Verlag, 1996.

¹¹Mergel A., et al., Phys. Rev. Lett., 2001, V. 86, p. 2257.

Экспериментальные точки взяты из работ^{10,11}. Как видно результаты расчета с функциями CPV и BK практически совпадают, но плохо согласуются с экспериментальными данными. Отсюда следует, что взаимодействия всех фрагментов в выходном канале на Рис. 4с важны для расчета и ими нельзя пренебречь.

Основные результаты диссертации

1. Сформулированы задача рассеяния и задача на связанные состояния для трех квантовых частиц с короткодействующими парными потенциалами в виде многоканальной спектральной задачи на собственные значения для систем связанных одномерных фредгольмовых интегральных уравнений на основе вариационного функционала Швингера и метода разложения Канторовича.

2. Разработаны ньютоновские вариационно-итерационные схемы и алгоритмы решения спектральных задач для систем связанных одномерных интегральных уравнений. На языке Фортран (FORTRAN77, FORTRAN90) создан пакет программ, реализующих разработанные схемы и позволяющий единообразно решать соответствующие спектральные задачи с заданной точностью.

3. Выполнены численные исследования точности и показана сходимость представленных вычислительных схем на точно решаемых одномерных и двумерных моделях, используемых в ядерной, атомной и молекулярной физике. Продемонстрирована высокая скорость сходимости метода Канторовича в задаче на связанные состояния для двумерной модели с граничными условиями третьего рода.

4. Разработанные вариационный метод и ньютоновский итерационный алгоритм реализованных в виде пакетов программ на языке Фортран (FORTRAN77, FORTRAN90), для расчета с заданной точностью связанных состояний трехчастичных гелиеподобных систем с парными кулоновскими потенциалами в факторизованном коррелированном базисе однопараметрических пробных функций.

5. Впервые получены верхние оценки энергии основного состояния нерелятивистской модели атома гелия и гелиеподобных атомов с точностью до двадцати двух знаков. Выполнен численный анализ скорости сходимости разложения решения по факторизованному однопараметрическому базису пробных функций и проведено сравнение этой скорости со скоростью сходимости в случае неполноты факторизованного базиса.

6. Для расчетов реакций ионизации быстрыми электронами и протонами построена двенадцати компонентная однопараметрическая вариационная функция основного состояния атома гелия. Эффективность выбранной параметризации продемонстрирована сравнением вычисленных сечений с известными экспериментальными данными и результатами, полученными с помощью многопараметрических вариационных функций.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

- [1] Chuluunbaatar O., Puzynin I.V. and Vinitsky S.I., "Uncoupled correlated calculations of helium isoelectronic bound states", E11-2000-190, JINR, Dubna, 2000, 15 с.
- [2] Чулуунбаатар О., Пузынин И.В., Виноцкий С.И., "Ньютоновская итерационная схема с вариационным функционалом Швингера для решения задачи рассеяния", P11-2001-61, ОИЯИ, Дубна, 2001, 16 с.
- [3] Чулуунбаатар О., Пузынин И.В., Павлов Д.В., Гусев А.А., Ларсен С.И., Виноцкий С.И., "Ньютоновские итерационные схемы решения задачи рассеяния для системы трех частиц на прямой", P11-2001-255, ОИЯИ, Дубна, 2001, 23 с.
- [4] Chuluunbaatar O., Puzynin I.V. and Vinitsky S.I., "Uncoupled correlated calculations of helium isoelectronic bound states", J. Phys. B, Atomic and Molecular Physics, 2001, V. 34, pp. L425-L432.
- [5] Chuluunbaatar O., Puzynin I.V., Pavlov D.V., Gusev A.A. , Larsen S.Y. and Vinitsky S.I., "Newtonian iteration schemes for solving the three-boson scattering problem on a line", in Laser Physics and Photonics, Spectroscopy and Molecular Modeling, Eds. V.L. Derbov, L.A. Melnikov, L. Babkov, Proc. SPIE, 2002, V. 4706, pp. 163-172.
- [6] Chuluunbaatar O., Puzynin I.V. and Vinitsky S.I., "Uncoupled correlated method for helium bound states", Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering, 2002, V. 2, pp. 31-35.
- [7] Chuluunbaatar O., Puzynin I.V. and Vinitsky S.I., "A Newtonian iteration scheme with the Schwinger variational functional for solving a scattering problem", Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering, 2002, V. 2, pp. 37-49.
- [8] Чулуунбаатар О., Попов Ю.В., Виноцкий С.И., "Факторизованная коррелированная вариационная функция в применении к расчетам $(e,2e)$ и $(e,3e)$ реакций ионизации атома гелия", P4-2002-134, ОИЯИ, Дубна, 2002, 8 с.
- [9] Popov Yu.V., Chuluunbaatar O., Vinitsky S.I., Ancarani L.U., Dal Cappello C. and Vinitsky P.S., " On study of the transfer ionization reactions at super small scattering angles", E4-2002-140, JINR, Dubna, 2002, 8 pp.; ЖЭТФ, 2002, Т. 122, с. 717-722.
- [10] Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Larsen S.Y. and Vinitsky S.I., "Three identical particles on a line: comparison of some exact and approximate calculations", J. Phys. A, Mathematical and General, 2002, V. 35, pp. L513-L525.

Макет Н. А. Киселевой

ЛР № 020579 от 23.06.97.

Подписано в печать 13.09.2002.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1,0. Уч.-изд. л. 1,2. Тираж 100 экз. Заказ № 53514.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.