Р11-2005-159

В. И. Кочкин

О ПОСТРОЕНИИ ГИПЕРСФЕРИЧЕСКОГО БАЗИСА ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА ТЕРМОВ ВАРИАЦИОННЫМ МЕТОДОМ В ЗАДАЧЕ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО РАССЕЯНИЯ В СИСТЕМЕ ТРЕХ α-ЧАСТИЦ

Кочкин В. И. Р11-2005-159
О построении гиперсферического базиса для численного расчета термов вариационным методом в задаче низкоэнергетического рассеяния в системе трех α-частиц

Рассмотрен вариационный алгоритм решения многомерного уравнения Шредингера методом «поверхностных» гиперсферических функций. Задача низкоэнергетического рассеяния в системе трех α-частиц решается численно с помощью созданной на основе данного алгоритма фортран-программы. Для иллюстрации приводятся некоторые численные результаты.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2005

Kochkin V. I. P11-2005-159
On Construction of the Hyperspherical Basis for the Numerical Calculation of the Terms by Means of Variational Method in the Problem of the Low-Energy Scattering of Three α-Particles

The variational algorithm for solving of the many-dimensional Schroedinger equation by means of the «surface» hyperspherical functions method is considered. The problem of the low-energy scattering in the system of three α-particles is calculated numerically with the help of the fortran-program created on the basis of this algorithm. Some numerical results for the illustration are presented.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 2005

В задаче низкоэнергетического рассеяния трех α-частиц в масштабированных координатах Якоби уравнение Шредингера системы трех тождественных бесспиновых частиц имеет вид

$$\left(-\Delta X_i - \Delta Y_i + \sum_{j=1}^{3} V\left(x_j\right) + V_3\left(\rho\right) - E\right)\Psi = 0, \tag{1}$$

$X_i = r_j - r_k$, $Y_i = \dfrac{2}{\sqrt{3}}\left(r_i - \dfrac{r_j + r_k}{2}\right)$, $i = j = k = 1, 2, 3$; r_i, r_j, r_k есть радиусы-векторы расстояний между частицами.

В гиперсферических координатах ρ, α, θ уравнение (1) записывается в виде

$$\left[-\frac{1}{\rho^5}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^5\frac{\partial}{\partial\rho}\right) - \frac{4}{\rho^2}\Delta^* + \sum V\left(\rho\cos\frac{\alpha_j}{2}\right) + V_3\left(\rho\right) - E\right]\Psi = 0, \tag{2}$$

$$\Delta^* = \frac{1}{\sin^2\alpha_i}\left[\frac{\partial}{\partial\alpha_i}\left(\sin^2\alpha_i\frac{\partial}{\partial\alpha_i}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta_i}\left(\sin\theta_i\frac{\partial}{\partial\theta_i}\right)\right], \tag{3}$$

$$0 \leqslant \rho < \infty; \quad 0 \leqslant \alpha, \quad \theta \leqslant \pi$$

$$x_i = \rho\,\cos\frac{\alpha_i}{2}, \quad y_i = \rho\,\sin\frac{\alpha_i}{2}, \quad \cos\,\theta_i = \frac{\left(\bar{X}_i\bar{Y}_i\right)}{x_i y_i}.$$

В уравнении (1) $V\left(x\right)$ есть эффективный двухчастичный потенциал в виде суммы кулоновского и короткодействующего потенциалов:

$$V\left(x\right) = V_s(x) + \frac{q}{x}.$$

Полный орбитальный момент $L = 0$; $V_s\left(x\right) = V_r e^{-\mu_r^2 x^2} - V_a e^{-\mu_a^2 x^2}$, как модифицированный потенциал Али–Бодмера [1], [3].

Трехчастичный потенциал $V_3\left(\rho\right)$ берется как функция гиперрадиуса ρ: $\mathrm{g}V_3\left(\rho\right) = V_0 e^{-(\rho/b)^2}$

Общее решение уравнения (2) ищется в виде ряда

$$\Psi = \rho^{-5/2}\sum_n f_n\left(\rho\right)\Phi_n\left(\alpha, \theta, \rho\right) \tag{4}$$

для каждого отдельного значения ρ как параметра; $n = 1, 2, 3, \ldots, m(m < \infty)$, так что $\rho = \rho_m$, $f_n\left(\rho\right) = f_n^m\left(\rho_m\right)$, $\Phi_n\left(\alpha, \theta, \rho\right) = \Phi_n^m\left(\alpha, \theta, \rho_m\right)$.

Отделяя радиальную часть в уравнении (2) от угловой, следуя работе [2], получаем уравнение при фиксированном значении ρ_m для определения поверхностных гиперсферических функций $\Phi^m(\alpha,\theta,\rho_m)$ как собственных функций для уравнения вида

$$\left[\Delta^* - \frac{\rho^2}{4}\sum_{j=1}^{3} V\left(\rho\cos\frac{\alpha_j}{2}\right) + \lambda_n(\rho)\right]\Phi_n(\alpha,\theta,\rho) = 0. \tag{5}$$

После определения функций $\Phi_n(\alpha,\theta,\rho)$ уравнение (2) подстановкой (4) сводится к системе гиперрадиальных уравнений:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{1}{\rho^2}\left(4\lambda_n(\rho) + \frac{15}{4}\right) - V_3(\rho) + E\right) f_n(\rho) + \\ + \sum_m \left(Q_{nm}(\rho)\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial}{\partial\rho}Q_{nm}(\rho) - P_{nm}(\rho)\right) f_m(\rho) = 0, \tag{6}$$

где

$$\begin{aligned} Q_{mn}(\rho) &= \left\langle \Phi_m \,\middle|\, \frac{\partial\Phi_n}{\partial\rho} \right\rangle, \\ P_{mn}(\rho) &= \left\langle \frac{\partial\Phi_m}{\partial\rho} \,\middle|\, \frac{\partial\Phi_n}{\partial\rho} \right\rangle. \end{aligned} \tag{7}$$

Уравнение (5) решаем вариационным методом, разлагая $\Phi_n(\alpha,\theta,\rho)$ по системе пробных функций $\chi_i(\alpha,\theta)$:

$$\Phi_n(\alpha,\theta,\rho) = \sum_{i=1}^{N} C_i^{(n)}\chi_i(\alpha,\theta), \tag{8}$$

ρ — параметр, $C_i^{(n)}$ — const.

Заменяя в уравнении (5) $\Phi_n(\alpha,\theta,\rho)$ их выражением в виде суммы (8), для каждого ρ получаем систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{gathered} \sum_{i=1}^{N}\left(D_{ki} - \frac{\rho}{4}\left(qU_{ki} + \rho V_{ki}\right) + \lambda_n S_{ki}\right) C_i^{(n)} = 0, \\ S_{ki} = \langle \chi_k \mid \chi_i \rangle, \quad D_{ki} = \langle \chi_k | \, \Delta^* \, | \chi_i \rangle, \quad U_{ki} = 3\left\langle \chi_k \left| \frac{1}{\cos\frac{\alpha}{2}} \right| \chi_i \right\rangle, \\ V_{ki} = 3\left\langle \chi_k \left| V_s\left(\rho\cos\frac{\alpha}{2}\right)\right| \chi_i \right\rangle. \end{gathered} \tag{9}$$

В матричном виде система (9) имеет вид

$$\left(D - U - V + \lambda\hat{S}\right) = 0, \tag{10}$$

где $D = (D_{ki})$, $U = (U_{ki})$, $V = (V_{ki})$, $\hat{S} = (S_{ki})$.

Обозначая $A = D - U - V$, $\hat{S} = -S$, уравнение (10) запишем в виде

$$A\bar{c} = \lambda S\bar{c}. \tag{11}$$

Уравнение (11) есть обобщенная алгебраическая задача на собственные значения λ для собственных векторов $\bar{c}$.

Таблица 1.

$\varepsilon_1(\rho)$	$\varepsilon_2(\rho)$	$P_{11}(\rho)$	$P_{22}(\rho)$
0,24852515E+03	0,38148823E+03	0,26198202E-01	0,44806348E-01
0,79494809E+02	0,11976386E+03	0,61238589E-01	0,60170645E-01
0,95227725E+01	0,41449885E+02	0,54483041E-01	0,12151977E+00
-0,70913981E+01	0,99241637E+01	0,68981344E-01	0,71874611E-01
-0,71140890E+01	0,92649631E+0	0,13574135E+00	0,13065691E+00
-0,45424859E+01	0,25538659E+00	0,13551838E+00	0,12792910E+00
-0,25559053E+01	0,16508355E+01	0,30656617E-01	0,24339414E-01
-0,11382151E+01	0,27311365E+01	0,13211951E-01	0,56487986E-02
-0,25025741E+00	0,32781160E+01	0,13322835E-01	0,34604602E-02
0,23471562E+00	0,34900903E+01	0,12567250E-01	0,41145004E-02
0,48542359E+00	0,35153973E+01	0,98768884E-02	0,14397760E-01
0,62949333E+00	0,34153997E+01	0,65131449E-02	0,39232702E-01
0,73595629E+00	0,32126131E+01	0,36534061E-02	0,43190837E-01
0,83101480E+00	0,29573615E+01	0,17926354E-02	0,20193873E-01
0,91873900E+00	0,27085990E+01	0,88759934E-03	0,68799362E-02
0,99546526E+00	0,24913962E+01	0,70744080E-03	0,24867613E-02
0,10569636E+01	0,23084094E+01	0,10057612E-02	0,14446860E-02
0,11009574E+01	0,21553381E+01	0,15482033E-02	0,15695622E-02
0,11274168E+01	0,20266977E+01	0,21101966E-02	0,20453722E-02
0,11380288E+01	0,19173903E+01	0,25047510E-02	0,24957602E-02
0,11354782E+01	0,18230552E+01	0,26326751E-02	0,27473769E-02
0,11227937E+01	0,17401273E+01	0,25048202E-02	0,27702341E-02
0,11028604E+01	0,16658263E+01	0,22080353E-02	0,26228432E-02
0,10781342E+01	0,15980974E+01	0,18443675E-02	0,23881286E-02
0,10505389E+01	0,15354997E+01	0,14889536E-02	0,21310455E-02
0,10214881E+01	0,14770660E+01	0,11803221E-02	0,18875359E-02
0,99196968E+00	0,14221628E+01	0,92965063E-03	0,16713524E-02
0,96264510E+00	0,13703737E+01	0,73343868E-03	0,14841932E-02
0,93393925E+00	0,13214144E+01	0,58261057E-03	0,13228626E-02
0,90611173E+00	0,12750759E+01	0,46735898E-03	0,11829583E-02

Пробные функции для вариационной задачи выбираются конструктивно, в данном случае при расчете на ЭВМ были применены системы многочленов Чебышева, Якоби и ряды экспонент.

Вся область изменения ρ (в единицах фм) в нашем расчете разбивается на две подобласти $0 \leqslant \rho \leqslant 20$ (I) и $20 < \rho \leq 50$ (II) и задача определения термов разделена на две задачи I и II после многочисленных предварительных расчетов на ЭВМ.

На интервале I изменения ρ используются пробные функции одного типа —- гиперсферические гармоники (ГГ)

$$\chi_i\left(r, \varphi\right) = A_i T_{3m_i}\left(\cos\frac{\varphi}{3}\right)\left(1+r\right)^{3m_i/2} P_{n_i}^{(0,3m_i)}\left(r\right),$$

T — многочлены Чебышева, P — многочлены Якоби, $i_{\max} = 147$.

На интервале II используются пробные функции трех типов:

$\chi_i\left(x\right) = x^{1/4}\,\exp\left(-2\sqrt{qx}\left(1+ax\right)\right)$, $i = 1$, асимптотический тип;

$\chi_i\left(x\right) = \exp\left(-\beta_i x^2\right)$, $2 \leqslant i \leqslant 4$ гауссовский тип;

$\chi_i\left(r, \varphi\right)$, $5 \leqslant i \leqslant 113$, гиперсферические гармоники.

Некоторые результаты тестирования и отладки общей программы расчета для случая I представлены в табл. 1 и 2.

Таблица 2. Терм ε_1, МэВ

ρ	10×10	37×37
1,0	248,525	248,591
2,0	79,494	79,199
8,0	−1,138	−1,160
10,0	0,234	0,206
20,0	1,138	0,636
25,0	1,050	0,592

10, 37 — размер матрицы A в формуле (11)

Если в системе гиперрадиальных уравнений (6) ограничиться одним уравнением, которое численно определяет для разных значений ρ одну радиальную функцию $f_1\left(\rho\right)$, то уравнение будет иметь вид

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{15}{4\rho^2} - \varepsilon_2\left(\rho\right) - P_{22}\left(\rho\right) - V_3\left(\rho\right) + E\right) f_1\left(\rho\right) = 0. \qquad (12)$$

Используя табличные (табл. 1) значения ε_2 и P_{22} и заменяя $\dfrac{d^2}{d\rho^2} f_1\left(\rho\right)$ разностной схемой, решаем обобщенную алгебраическую задачу для уравнения (12).

$\min E$ дает значение $-5{,}1176$ МэВ, экспериментально $-7,27$ МэВ.

Автор выражает благодарность коллегам-соавторам статьи [1] С. И. Федотову, О. И. Картавцеву, А. В. Малых и всем участникам обсуждения настоящей работы на семинаре ЛИТ ОИЯИ по вычислительной математике.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Fedotov S. I. et al.* 3α-cluster structure of the O^+ states in ^{12}C and the effective $\alpha-\alpha$ interactions // Phys. Rev. C. 2004. V. 70. P. 014006.

2. *Macek J. H.* // J. Phys. B. 1968. V. 1. P. 831.

3. *Ali S., Bodmer A. R.* // Nucl. Phys. 1966. V. 80. P. 99.

4. IMSL LCD-0007. Library contents document, Houston, Texas, 1979, January.

5. *Gusev V. V. et al.* // Few-Body Systems. 1990. V. 9. P. 137.

6. *Беляев В. Б., Картавцев О. И., Кочкин В. И.* Сообщение ОИЯИ Р4-92-297. Дубна, 1992.

7. *Беляев В. Б., Картавцев О. И., Кочкин В. И.* Сообщение ОИЯИ Р4-93-460. Дубна, 1993.

8. *Belyaev V. B. et al.* // Phys. Rev. A. 1995. V. 52. P. 1765.

9. *Кочкин В. И.* Программа на языке фортран. Сообщение ОИЯИ Р11-96-130. Дубна, 1996.

10. *Кочкин В. И.* О построении гиперсферического базиса в проблеме трех тел с кулоновским взаимодействием. Сообщение ОИЯИ Р11-2000-146. Дубна, 2000.

Получено 18 октября 2005 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 2.12.2005.
Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 0,31. Уч.-изд. л. 0,34. Тираж 310 экз. Заказ № 55129.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.
E-mail: publish@pds.jinr.ru
www.jinr.ru/publish/