P11-2006-134

В. И. Кочкин

О ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЙ ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ С ПОМОЩЬЮ БАЗИСА ГИПЕРСФЕРИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ

В. И. Кочкин P11-2006-134
О численном решении уравнения Шредингера
в квантово-механической задаче трех тел
с помощью базиса гиперсферических функций

Реферативно, на примере ряда задач для трехчастичных систем в квантовой механике низких энергий, рассматривается общая вариационная схема численного решения многомерного уравнения Шредингера на основе построения гиперсферического базиса. Решение разбивается на два этапа: 1) нахождение гиперсферического базиса и 2) определение волновой функции Ψ. Более подробно рассмотрен алгоритм вычисления энергии E основного состояния системы трех заряженных частиц на основе схемы, описанной автором.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2006

Перевод авторов

Kochkin V. I. P11-2006-134
On Numerical Calculation of Many-Dimensional
Schrödinger Equation in Quantum Mechanical Three-Body Problem
by Means of Basic Hyperspherical Functions

Based on an example of quantum mechanical low energy three-body systems, the common variational scheme that allows solving the many-dimensional Schrödinger equation numerically by constructing hyperspherical functions is considered. The numerical solution is derived in two stages: 1) determination of the hyperspherical functions and 2) calculation of the wave-function Ψ. The detailed algorithm for determination of the bound state energy E of three charged particles is described.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2006

ВВЕДЕНИЕ

Метод поверхностных функций, или метод гиперсферического базиса, успешно применяется для расчетов трехчастичных систем в квантово-механических задачах, начиная с пионерских работ [1–2].

В секторе малочастичных систем ЛТФ ОИЯИ с 1991 г. с помощью метода гиперсферических функций были проведены по составленным на основе разработанных алгоритмов программам для ЭВМ расчеты термов для системы H^- и для систем $Z\mathrm{H}_\mu$ (z — легкое ядро с зарядом $1 \div 3$; H — одно из ядер p, d, t и μ–μ-мезон). При этом в задачах на связанные состояния рассчитывались системы трех частиц такие, как dt_μ, $^{3,4}\mathrm{He}d_\mu$, $^{3,4}\mathrm{He}p_\mu$, $^{3,4}\mathrm{He}t_\mu$, e^+H, $\mathrm{He}de$ [3–5].

В последнее время, в 2001–2004 гг., для решения уравнения Шредингера в задаче низкоэнергетического рассеяния в системе трех α-частиц автором совместно с сотрудниками ЛТФ ОИЯИ О. И. Картавцевым и С. И. Федотовым были разработаны алгоритмы [6] и создана фортран-программа (α), в которой вместе с расчетом вариационным методом гиперсферического базиса получаются все необходимые величины, коэффициенты и термы для решения дифференциальных уравнений при численном определении волновой функции из уравнения Шредингера для трех α-частиц, кроме энергии E связанного состояния 3α (ядро атома C^{12}), для которой, вообще говоря, есть экспериментальное значение [7]. Данное сообщение предлагает способ численного определения E (программа (β)) на основе результатов, полученных программой (α).

1. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим основные уравнения, которые решались на ЭВМ.

1) Для системы H^- (при полном угловом моменте $L = 0$) три заряженные частицы $Z2e$ (z — протон, $2e$ — два электрона) в координатах Якоби уравнение Шредингера имеет вид [3]:

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

В гиперсферических переменных $\rho,\ \alpha,\ \theta$ при

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

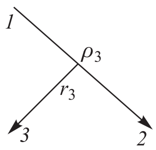
уравнение (1) будет

$$\begin{gathered}\left[\frac{1}{\rho^5}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^5\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{4}{\rho^2}\Box+2E+\frac{2}{\rho}U\right]\psi=0,\\ \Box=\frac{1}{\sin^2\alpha}\left(\frac{\partial}{\partial\alpha}\sin^2\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right),\\ U=-\frac{1}{2}\rho V,\ \ V=-\frac{Z}{r_1}-\frac{Z}{r_2}+\frac{1}{|r_1-r_2|}.\end{gathered}\tag{1'}$$

2) Для системы ZH_μ рассматриваются три заряженные частицы с массами $m_1,\ m_2,\ m_3$ и зарядами $Z_1,\ Z_2,\ Z_3$; тогда уравнение Шредингера в случае кулоновской задачи может быть записано в виде

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu_2}\Delta_{\rho_3}--\frac{\hbar^2}{2\mu_1}\Delta_{r_3}+e^2\sum_{i\neq j}\frac{Z_iZ_j}{r_{ij}}-E\right)\psi=0.\tag{2}$$

Введем координаты Якоби (см. рисунок):



$$\begin{gathered}\overline{x}_i=\sqrt{\frac{m_jm_k}{m_1(m_j+m_k)}}\cdot(\overline{r}_k+\overline{r}_j),\\ \overline{y}_i=\sqrt{\frac{m_i(m_j+m_k)}{m_1(m_1+m_2+m_3)}}\cdot\left(\overline{r}_i-\frac{m_j\overline{r}_j+m_k\overline{r}_k}{m_j+m_k}\right),\ \ (i\ j\ k);\end{gathered}\tag{2'}$$

$\overline{r}_i$ — радиус-вектор i-й частицы, полный орбитальный момент L=0.

Уравнение (2) в координатах Якоби примет вид [4]:

$$\left(-\Delta\overline{x}_i-\Delta\overline{y}_i+\sum_{m=1}^{3}\frac{q_m}{|\overline{x}_m|}-E\right)\psi=0,\tag{3}$$

$$\begin{gathered}q_i=2Z_jZ_k\sqrt{\frac{m_jm_k}{m_1\,(m_j+m_k)}},\ \ i=1,\,2,\,3;\\ \mu_1=\frac{m_3\,(m_1+m_2)}{m_1+m_2+m_3};\ \ \mu_2=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}.\end{gathered}$$

В гиперсферических координатах $\rho,\ \alpha_i,\ \theta_i$ при

$$|\overline{x}_i|=\rho\cos\frac{\alpha_i}{2},\ \ |\overline{y}_i|=\rho\sin\frac{\alpha_i}{2},\ \ \cos\theta_i=\frac{(x_iy_i)}{|x_i|\,|y_i|}$$

уравнение (3) записывается в виде

$$\left[-\frac{1}{\rho^5}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^5\frac{\partial}{\partial\rho}\right)-\frac{4}{\rho^2}\Box^*+\frac{1}{\rho}\sum_{m=1}^{3}\frac{q_m}{\cos\left(\alpha_m/2\right)}-E\right]\psi=0. \tag{4}$$

Здесь используются следующие единицы энергии, длины и массы:

$$E_0=\frac{\widetilde{m}e^4}{2\hbar^2},\ \ L_0=\frac{\hbar^2}{\widetilde{m}e^2},\ \ \widetilde{m}=m_1,$$

$$\Box^*=\frac{1}{\sin^2\alpha_i}\left(\frac{\partial}{\partial\alpha_i}\left(\sin^2\alpha_i\frac{\partial}{\partial\alpha_i}\right)+\frac{1}{\sin\theta_i}\frac{\partial}{\partial\theta_i}\left(\sin\theta_i\frac{\partial}{\partial\theta_i}\right)\right).$$

3) Наконец, в задаче низкоэнергетического рассеяния трех α-частиц в масштабированных координатах Якоби рассматривается уравнение Шредингера системы трех заряженных тождественных бесспиновых частиц [6, 8]:

$$\left(-\Delta X_i-\Delta Y_i+\sum_{j=1}^{3}V(x_j)+V_3(\rho)-E\right)\psi=0, \tag{5}$$

так как массы в этом случае равны, то выражения $(2')$ будут

$$X_i=r_j-r_k,$$

$$Y_i=\frac{2}{\sqrt{3}}\cdot\left(r_i-\frac{r_j+r_k}{2}\right),\ \ i=j=k=1,2,3;$$

$r_i,\ r_j,\ r_k$ есть радиусы-векторы расстояний между частицами;

$$\left|\overline{X}_i\right|=x_i,\ \ \left|\overline{Y}_i\right|=y_i.$$

В гиперсферических переменных $\rho,\ \alpha,\ \theta$ уравнение (5) будет:

$$\left[-\frac{1}{\rho^5}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^5\frac{\partial}{\partial\rho}\right)-\frac{4}{\rho^2}\Box^*+\sum_{j=1}^{3}V\left(\rho\cos\frac{\alpha_i}{2}\right)+V_3(\rho)-E\right]\psi=0, \tag{5'}$$

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

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

$V(x)=V_S(x)+q/x$, т. е. это сумма кулоновского и короткодействующего потенциалов, или эффективный двухчастичный потенциал.

Орбитальный момент $L=0$, $V_S=V_r\mathrm{e}^{-\mu_r^2x^2}-V_a\mathrm{e}^{-\mu_a^2x^2}$ (модифицированный потенциал Али–Бодмера);
$V_3(\rho)$ — функция гиперрадиуса ρ;

$$V_3(\rho)=V_0\mathrm{e}^{-(\rho/b)^2};\ \ V_0,\ b\text{ — const.} \tag{5''}$$

2. ПОСТРОЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ФУНКЦИЙ

Уравнения ($1'$), (4), ($5'$) в гиперсферических координатах ρ, α, θ рассмотрим вместе:

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

$$\left[-\frac{1}{\rho^5}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^5\frac{\partial}{\partial\rho}\right)-\frac{4}{\rho^2}\Box^*+\frac{1}{\rho}\sum_{m=1}^{3}\frac{q_m}{\cos{(\alpha_m/2)}}-E\right]\psi=0, \tag{4}$$

$$\left[-\frac{1}{\rho^5}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^5\frac{\partial}{\partial\rho}\right)-\frac{4}{\rho^2}\Box^*+\sum_{j=1}^{3}V\left(\rho\cos\frac{\alpha_i}{2}\right)+V_3(\rho)-E\right]\psi=0. \tag{$5'$}$$

Идея метода «поверхностных» гиперсферических функций состоит в следующем: в уравнениях ($1'$), (4), ($5'$) отделяется радиальная (кинетическая) часть этих уравнений от угловой и потенциальной частей и получаются уравнения:

$$(\Box+\rho U+\lambda_n)\,\varphi_n=0, \tag{6^1}$$

$$\left(\Box-\frac{1}{4}\rho\sum_{m=1}^{3}\frac{q_m}{\cos{(\alpha_m/2)}}+\lambda_n\right)\varphi_n=0, \tag{6^2}$$

$$\left(\Box-\frac{\rho^2}{4}\sum_{j=1}^{3}V\left(\rho\cos\frac{\alpha_j}{2}\right)+\lambda_n(\rho)\right)\varphi_n\,(\alpha,\theta,\rho)=0. \tag{6^3}$$

Радиальная переменная ρ в уравнениях (6^1), (6^2), (6^3) становится параметром, $0\leqslant\rho<\infty$; $0\leqslant\alpha,\theta\leqslant\pi$. Поверхностные гиперсферические функции φ_n являются решениями уравнений (6^1), (6^2), (6^3), численно находятся вариационным методом, параметрически зависят от радиуса ρ и для каждого значения ρ вычисляются отдельно (берется конечное число значений $\rho\,(\rho_1,\rho_2,\ \ldots,\rho_N)$ с шагом $\Delta\rho=(\rho_{n+1}-\rho_n)$).

Для уравнений (6^1), (6^2), (6^3) поверхностные функции будут различны, но по форме одинаковы:

$$\left.\begin{array}{ll}\text{1а)} & \varphi_n\,(\alpha,x)=\sum\limits_{i=1}^{N_1}c_i^{(n)}\chi_i\,(\alpha,x),\\ \text{2а)} & \varphi_n\,(\alpha,\theta)=\sum\limits_{i=1}^{N_1}c_i^{(n)}\chi_i\,(\alpha,\theta),\\ \text{3а)} & \Phi_n\,(\alpha,\theta,\rho)=\sum\limits_{i=1}^{N_1}c_i^{(n)}\chi_i\,(\alpha,\theta,\rho),\end{array}\right\} \tag{7}$$

$x=\cos\theta$, $\chi_i\,(\alpha,x)$ — пробные функции (задаются в расчете).

В 1-м и 2-м случаях пробные функции χ_i строятся из показательной, степенной функции и включают в себя ортогональные многочлены Лежандра, Лагерра и Гегенбауэра. В 3-м случае в систему пробных функций входят многочлены Чебышева, Якоби и экспоненты.

По вариационной процедуре уравнения (6^1), (6^2), (6^3) с помощью выражений (7) переходят в системы линейных алгебраических уравнений для определения неизвестных $\lambda_n,\ c_i^n$. Так для уравнения $\{6^1\}$ будет следующая система [3]:

$$\begin{aligned}&\sum_{i=1}^{N}\left(D_{ni}+\rho U_{ni}+\lambda S_{ni}\right)c_i^{(n)}=0,\\&S_{ni}=\langle\chi_n\mid\chi_i\rangle\,;\;\;U_{ni}=\langle\chi_n\,|U|\;\chi_i\rangle\,;\;\;D_{ni}=\langle\chi_n\,|\Box|\;\chi_i\rangle\,,\\&i,\ n=1,\ldots,N.\end{aligned}\tag{8}$$

Элементы матриц вычисляются как двойные интегралы от пробных функций.

Обозначим $A=\left(D_{ni}+\rho U_{ni}\right),\ S=\left(-S_{ni}\right)$; получим матричное уравнение

$$Az=\lambda Sz,\tag{9}$$

которое есть обобщенная задача на собственные значения.

При решении системы (9) для каждого значения $\rho\left(\rho_1,\rho_2,\ \ldots,\rho_k,\ldots\right)$ строятся матрицы $A,\ S$ и при решении обобщенной задачи на собственные значения находится ровно столько собственных значений λ, какова размерность матриц A и S:

$$\begin{array}{cc}\rho=\rho_1 & \xrightarrow{\text{имеем}}\\ \rho=\rho_2 & \rightarrow\\ \vdots & \\ \rho=\rho_2 & \rightarrow\end{array}\left|\begin{array}{c}\lambda_1\left(\rho_1\right),\lambda_2\left(\rho_1\right),\ldots,\lambda_N\left(\rho_1\right)\\ \lambda_1\left(\rho_2\right),\lambda_2\left(\rho_2\right),\ldots,\lambda_N\left(\rho_2\right)\\ \vdots\qquad\quad\vdots\qquad\quad\vdots\\ \lambda_1\left(\rho_N\right),\lambda_2\left(\rho_N\right),\ldots,\lambda_N\left(\rho_N\right)\end{array}\right|.\tag{9$'$}$$

В обобщенной задаче на собственные значения для каждого λ_i есть свой собственный вектор, т. е. для каждого значения параметра ρ_k имеем строку собственных значений $\lambda_i\left(\rho_k\right)$ и матрицу собственных векторов

$$\left|\begin{array}{c}c_1^1\left(\rho_k\right),c_2^1\left(\rho_k\right),\ldots,c_N^1\left(\rho_k\right)\\ c_1^2\left(\rho_k\right),c_2^2\left(\rho_k\right),\ldots,c_N^2\left(\rho_k\right)\\ \vdots\qquad\quad\vdots\qquad\quad\vdots\\ c_1^N\left(\rho_k\right),c_2^N\left(\rho_k\right),\ldots,c_N^N\left(\rho_k\right)\end{array}\right|.\tag{9$''$}$$

Формула ($9'$) при соотношении

$$\varepsilon_i\left(\rho_n\right)=\frac{4}{\rho_n^2}\lambda_i\left(\rho_n\right)$$

переходит в упорядоченную запись

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_1(\rho_1), \varepsilon_2(\rho_1), \ldots, \varepsilon_n(\rho_1) \\ \varepsilon_1(\rho_2), \varepsilon_2(\rho_2), \ldots, \varepsilon_n(\rho_2) \\ \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \\ \varepsilon_1(\rho_n), \varepsilon_2(\rho_n), \ldots, \varepsilon_n(\rho_n) \end{vmatrix}. \tag{9'''}$$

Выражения (9‴) будут использованы в дальнейшем.

Формулы (7) после выбора пробных функций χ_i и нахождения неизвестных коэффициентов $c_i^{(n)}$ полностью определяют решения уравнений (6^1), (6^2), (6^3) для гиперсферических функций и тем самым гиперсферический базис рассматриваемых задач будет определен.

3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ψ

Каждое из уравнений (1′), (4), (5′) с помощью своего гиперсферического базиса решается путем представления волновой функции ψ в виде разложения по этому базису с неизвестными радиальными функциями $\upsilon_n(\rho)$ [3, 4, 6]:

$$1б) \quad \psi = \sum_{n=1}^{N} \upsilon_n(\rho)\ \varphi_n(\alpha, x), \quad x = \cos\theta$$

$$2б) \quad \psi = \rho^{-5/2} \sum_{n=1}^{N} \upsilon_n(\rho)\ \varphi_n(\alpha, \theta),$$

$$3б) \quad \psi = \rho^{-5/2} \sum_{n=1}^{N} \upsilon_n(\rho)\ \Phi_n(\alpha, \theta, \rho), \ N < \infty.$$

Подстановка, например, выражений 2б, 3б в уравнения (4), (5′) сразу дает следующие системы одномерных дифференциальных уравнений, в отдельности для (4) и (5′):

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{15}{4\rho^2} - \varepsilon_n(\rho) + E\right)\upsilon_n(\rho) + \\ + \sum_{i=1}^{N_1}\left(Q_{ni}(\rho)\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial}{\partial\rho}Q_{ni}(\rho) - P_{ni}(\rho)\right)\upsilon_i(\rho) = 0, \tag{10}$$

$$n = 1, 2, \ldots, N_1; \ \ N_1 < \infty,$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{1}{\rho^2}\left(4\lambda_n(\rho) + \frac{15}{4}\right) - V_3(\rho) + E\right)\upsilon_n(\rho) + \\ + \sum_{i=1}^{N_1}\left(Q_{ni}(\rho)\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial}{\partial\rho}Q_{ni}(\rho) - P_{ni}(\rho)\right)\upsilon_i(\rho) = 0. \tag{11}$$

В уравнениях (10), (11)

$$Q_{ni} = \Big\langle \varphi_n \Big| \frac{\partial \varphi_i}{\partial \rho} \Big\rangle; \;\; P_{ni} = \Big\langle \frac{\partial \varphi_n}{\partial \rho} \Big| \frac{\partial \varphi_i}{\partial \rho} \Big\rangle; \;\; \varepsilon_n = \frac{4}{\rho^2} \lambda_n.$$

Уравнения (10) и (11) есть основные уравнения для определения значений неизвестных функций $\upsilon_n(\rho)$.

Рассмотрим систему уравнений (11), она имеет такой же вид, как и система (10), с небольшими изменениями

$$\Big(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \Big(\frac{15}{4\rho^2} + \varepsilon_n(\rho) + V_3(\rho) \Big) + E \Big) \upsilon_n(\rho) + \\ + \sum_{i=1}^{N_1} \Big(Q_{ni}(\rho) \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial}{\partial \rho} Q_{ni}(\rho) - P_{ni}(\rho) \Big) \upsilon_i(\rho) = 0, \quad (12)$$

$$n = 1, 2, \ldots, N_1; \;\; N_1 < \infty.$$

Система уравнений (12) для каждого n решается отдельно, начиная с $n = 1$ и т. д. Вторая производная $(\partial^2 \upsilon_n(\rho))/\partial \rho^2$ заменяется конечной разностью:

$$\frac{\partial^2 \upsilon_n(\rho)}{\partial \rho^2} = (\upsilon_{n+1} - 2\upsilon_n + \upsilon_{n-1})/h^2, \quad (12')$$

$$h = \rho_{k-1} - \rho_k, \;\; \rho_{k+1} = \rho_k + h, \;\;\; \rho_k = \rho_1 + (k-1)h,$$
$$\rho_1 \leqslant \rho_k \leqslant \rho_N,$$

$\varepsilon_n(\rho_k)$ задано таблично; $Q_{ni}(\rho_k)$ и $P_{ni}(\rho_k)$ — таблицы.

Для $n = 1$, $N_1 = 1$, экстремо-адиабатическое приближение

$$\Big[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{15}{4\rho^2} - \varepsilon_1(\rho) - P_{11}(\rho) - V_3(\rho) + E \Big] \upsilon_1(\rho) = 0; \;\; Q_{11}(\rho) = 0. \quad (13)$$

Для $n = 2$, $N_1 = 1$,

$$\Big[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{15}{4\rho^2} - \varepsilon_2(\rho) - P_{22}(\rho) - V_3(\rho) + E \Big] \upsilon_2(\rho) = 0 \quad (14)$$

$$\text{при} \;\; \upsilon_2(0) = \upsilon_2(\infty) = 0. \quad (14')$$

Для $n = 3$

$$\Big[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{15}{4\rho^2} - \varepsilon_3(\rho) - V_3(\rho) + E \Big] \upsilon_3(\rho) + \\ [-6pt] + \sum_{i=1}^{N_1} \Big(Q_{3i}(\rho) \frac{d}{d\rho} + \frac{\partial}{\partial \rho} Q_{3i}(\rho) - P_{3i}(\rho) \Big) \upsilon_i(\rho) = 0 \quad (15)$$

и т. д. для $n = 4, \ldots$ при условии (14′)

Из уравнения (14) определяем E, как собственное значение, и радиальную функцию $\upsilon_2(\rho)$ для дискретных значений ρ_k.

Столбцы матрицы $(9''')$ образуют необходимые численные значения термов $\varepsilon_n(\rho)$. Из уравнения (14) при обозначении $\upsilon_2(\rho_k) = \upsilon_k$, используя замену $(12')$, получаем конечно-разностные уравнения для неизвестных υ_k и для определения E:

$$-\left[\upsilon_{k+1} - 2\upsilon_k + \upsilon_{k-1}\right]/h^2 + \left[\frac{15}{4}\frac{1}{\rho_k^2} + \varepsilon_2(\rho_k) + P_{22}(\rho_k) + V_3(\rho_k)\right]\upsilon_k = E\upsilon_k. \tag{16}$$

После приведения подобных членов уравнение (16) принимает вид

$$-\upsilon_{k-1} + \left[\left(\frac{15}{4}\frac{1}{\rho_k^2} + \varepsilon_2^k + P_{22}^k + V_3^k\right)h^2 + 2\right]\upsilon_k - \upsilon_{k+1} = \lambda h^2 \upsilon_k, \tag{17}$$

где обозначено $\varepsilon_2^k = \varepsilon_2(\rho_k)\,; P_{22}^k = P_{22}(\rho_k)\,;\ V_3^k = V_3(\rho_k)$ и

$$\left[\left(\frac{15}{4}\frac{1}{\rho_k^2} + \varepsilon_2^k + P_{22}^k + V_3^k\right)h^2 + 2\right] = c_k, \qquad E = \lambda.$$

Для $k = 1, \ldots, N$ имеем систему линейных алгебраических уравнений:

$$\left.\begin{array}{l|l} k=1\ \rightarrow & c_1\upsilon_1 - \upsilon_2 = \lambda h^2 \upsilon_1, \\ k=2\ \rightarrow & -\upsilon_1 + c_2\upsilon_2 - \upsilon_3 = \lambda h^2 \upsilon_2, \\ k=3\ \rightarrow & -\upsilon_2 + c_3\upsilon_3 - \upsilon_4 = \lambda h^2 \upsilon_3, \\ \ldots & \ldots\quad \ldots\quad \ldots\quad \ldots \\ k=N \rightarrow & -\upsilon_{N-1} + c_N\upsilon_N = \lambda h^2 \upsilon_N. \end{array}\right\}. \tag{18}$$

Для системы (18) вектор $\overline{\upsilon} = (\upsilon_1, \upsilon_2, \ldots, \upsilon_N)$ и собственные значения λ являются неизвестными.

Если ввести обозначения:

$$A = \left|\begin{array}{lllll} c_1, & -1, & 0 & \ldots, & 0 \\ -1, & c_2, & -1, & \ldots, & 0 \\ 0, & -1, & c_3, & \ldots, & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & & \\ 0, & 0, & \ldots, & -1, & c_N \end{array}\right|, S = \left|\begin{array}{lllll} h^2, & 0, & 0, & \ldots, & 0 \\ 0, & h^2, & 0, & \ldots, & 0 \\ 0, & 0, & h^2 & \ldots, & 0 \\ \ldots & & \ldots & \ldots & \\ 0, & 0, & 0, & \ldots, & h^2 \end{array}\right|, \tag{19}$$

то система (18) будет

$$A\overline{\upsilon} = \lambda S\overline{\upsilon}, \tag{20}$$

A — трехдиагональная матрица; S — единичная диагональная матрица; λ — собственные значения.

Матричное уравнение (20) есть обобщенная алгебраическая задача на собственные значения.

Минимальное значение λ есть искомая величина E для уравнения $(5')$, и соответствующий собственный вектор $\overline{\upsilon}_2$ есть численное значение $\overline{\upsilon}_2(\rho) = (\upsilon_2(\rho_1), \upsilon_2(\rho_2), \ldots, \upsilon_2(\rho_N))$. При решении уравнения (20) использовалась система ст. п/п IMSL [9].

Автор выражает искреннюю благодарность за внимание к работе А. В. Малых, С. И. Федотову, О. И. Картавцеву, а также всем слушателям семинара по вычислительной математике ЛИТ ОИЯИ.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Macek J. H.* // J. Phys. B. 1968. V.1. P.831.
2. *Gusev V. V. et al.* // Few-Body System. 1990. V.9. P.137.
3. *Беляев В. Б., Картавцев О. И., Кочкин В. И.* Сообщение ОИЯИ Р4-92-297. Дубна, 1992.
4. *Беляев В. Б., Картавцев О. И., Кочкин В. И.* Сообщение ОИЯИ Р4-93-460. Дубна, 1993.
5. *Belyaev V. B. et al.* // Phys. Rev. A. 1995. V.52. P.1765.
6. *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.
7. *Fedorov D. V., Jensen A. S.* // Phys. Lett. 1996. V.389. P.631.
8. *Кочкин В. И.* Сообщение ОИЯИ Р11-2005-159. Дубна, 2005.
9. IMSL LCD – 0007, Library contents document. Houston, Texas, January, 1979.

Получено 29 сентября 2006 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 06.12.2006.
Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 0,56. Уч.-изд. л. 0,71. Тираж 310 экз. Заказ № 55574.

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