УДК 519.6; 539.1.

С.Б. ДУБОВИЧЕНКО

МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧ ЯДЕРНОЙ АСТРОФИЗИКИ

I. Метод невязок для решения задачи на собственные значения для системы дифференциальных уравнений второго порядка

Рассмотрены некоторые нестандартные методы численного решения уравнения Шредингера или системы таких уравнений с тензорными силами в задачах ядерной физики низких энергий и ядерной астрофизики, применимые для анализа связанных состояний атомных ядер в потенциальной кластерной модели

Множество задач теоретической ядерной физики, особенно в области ядерной физики низких энергий [1] и ядерной астрофизики [2], требуют решения уравнения Шредингера или связанной системы уравнений такого типа. Результатом решения является волновая функция, которая описывает квантовое состояние системы ядерных частиц и, в принципе, содержит всю информацию о таком состоянии.

Существует довольно много различных методов решения дифференциальных уравнений второго порядка или их систем. Однако, в литературе приводятся, в основном, общие методы решений таких уравнений, которые бывает достаточно сложно применить для решения конкретного уравнения Шредингера. Проблему обычно составляет выбор наиболее оптимального математического метода, применимого для рассмотрения определенных задач, основанных на решениях уравнения Шредингера.

Решению некоторых из этих проблем посвящена данная работа, в которой описываются математические методы, непосредственно применимые для нахождения волновых функций из уравнения Шредингера или систем таких уравнений в задачах ядерной физики низких энергий и ядерной астрофизики на связанные состояния двух квантовых частиц.

Для расчетов энергии и волновых функций связанных состояний двухчастичной ядерной системы с тензорными потенциалами в определенных задачах ядерной астрофизики будем исходить из обычных уравнений Шредингера [1]

$$u''(r) + [\, k^2 - V_c(r) - V_{cul}(r)]u(r) = \sqrt{8}\, V_t(r)w(r)\ ,$$
$$w''(r) + [\, k^2 - V_c(r) - 6/r^2 - V_{cul}(r) +$$
$$+2\, V_t(r)\,]w(r) = \sqrt{8}\, V_t(r)u(r)\ , \qquad (1)$$

где u(r) и w(r) – скалярные волновые функции; r – скалярное расстояние между частицами, измеряемое в Ферми (Фм); $V_{cul}(r)= 2\mu/\hbar^2\, Z_1Z_2/r$ – кулоновский потенциал в Фм$^{-2}$; $\hbar$ – постоянная Планка; Z_1, Z_2 – заряды частиц в единицах элементарного заряда; μ - приведенная масса двух частиц, равная $m_1m_2/(m_1+m_2)$ в атомных единица массы (а.е.м.); константа $\hbar^2/M_N$ = 41.4686 (или 41.47) МэВ Фм^2; M_N – средняя масса нуклона, равная 1 а.е.м.; $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$ - волновое число относительного движения частиц в Фм$^{-2}$; E – энергия относительного движения частиц в мегаэлектронвольтах (МэВ); $V_c = 2\mu/\hbar^2 V_{cn}(r)$ - центральная часть потенциала в Фм$^{-2}$; $V_t = 2\mu/\hbar^2 V_{ct}(r)$ – тензорная часть потенциала в Фм$^{-2}$; $V_{cn}(r)$, $V_{ct}(r)$ – радиальная часть центрального и тензорного потенциала, которая может быть представлена в виде гауссойды или экспоненты вида $V_{cn}(r) = V_{c0}\exp(-\alpha r)$, здесь V_{c0} – глубина потенциала в МэВ, α – его ширина в Фм$^{-2}$; L – орбитальный момент, который может принимать целочисленные положительные значения.

Решением этой системы являются четыре волновые функции, получающиеся с различными начальными условиями вида

1) $u_1(0)=0$, $u'_1(0)=1$, $w_1(0)=0$, $w'_1(0)=0$,
2) $u_2(0)=0$, $u'_2(0)=0$, $w_2(0)=0$, $w'_2(0)=1$,

которые образуют линейно независимые комбинации, представляемые в виде (для S и D орбитальных состояний при L = 0 и 2)

$$u = \chi_0 = C_1u_1 + C_2u_2 = \exp(-kr)\ ,$$
$$w = \chi_2 = C_1w_1 + C_2w_2 = [1 + 3/kr + 3/(kr)^2]\exp(-kr)$$

или с учетом кулоновских сил

$$\chi_0 = C_1 u_1 + C_2 u_2 = W_{\eta,0}(2kr),$$

$$\chi_2 = C_1 w_1 + C_2 w_2 = W_{\eta,2}(2kr),$$

где $W_{\eta,L}(2kr) = W_{hL}(Z)$ – функция Уиттекера [1] для связанных состояний, которая является решением исходных уравнений (1) при $k^2<0$ без ядерных потенциалов V_c и V_t; $Z = 2kR$;

$\eta = \dfrac{\mu Z_1 Z_2}{k\hbar^2}$ – кулоновский параметр;

Волновые функции связанных состояний нормированы на единицу следующим образом

$$\int[\chi_0^2+\chi_2^2]dr = 1.$$

Интеграл от квадрата волновой функции D состояния, т.е. при $L = 2$, определяет ее вес, обычно выражаемый в процентах.

Для нахождения энергий (k^2) и волновых функций (ВФ) связанных состояний ядерной системы χ_L с тензорным потенциалом можно использовать комбинацию численных и вариационных методов. А именно, при некоторой заданной энергии связанного состояния (которая не является собственным значением задачи) численным методом находилась ВФ приведенной выше системы (1). Для этого можно использовать, например, обычный метод Рунге - Кутта. Затем система уравнений (1) представляется в конечно - разностном виде, с выражением второй производной в центральных разностях

$$u = (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1})/h^2.$$

Тогда получим

$$u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1} + h^2[k^2 - V_c - V_{cul}]u_i = h^2\sqrt{8}\,V_t w_i,$$

$$w_{i+1} - 2w_i + w_{i-1} + h^2[k^2 - V_c - 6/r^2 - V_{cul} + 2V_t]w_i = h^2\sqrt{8}\,V_t u_i$$

или

$$u_{i+1} + h^2[-2/h^2 + k^2 - V_c - V_{cul}]u_i + u_{i-1} - h^2\sqrt{8}\,V_t w_i = 0,$$

$$w_{i+1} + h^2[-2/h^2 + k^2 - V_c - 6/r^2 - V_{cul} + 2V_t]w_i + w_{i-1} - h^2\sqrt{8}\,V_t u_i = 0.$$

Найденная, методом Рунге-Кутта, численная ВФ подставляется в эту систему уравнений. Левая часть этих уравнений будет равна нулю только в случае, когда энергия и ВФ являются собственными решениями такой задачи. При произвольной энергии и найденной по ней ВФ левая часть будет отлична от нуля, и можно говорить о методе невязок [3], который позволяет оценить степень точности нахождения собственных функций и собственных значений.

Из численных уравнений вида

$$N_{si} = u_{i+1} + h^2[-2/h^2 + k^2 - V_c - V_{cul}]u_i + u_{i-1} - h^2\sqrt{8}\,V_t w_i,$$

$$N_{ti} = w_{i+1} + h^2[-2/h^2 + k^2 - V_c - 6/r^2 - V_{cul} + 2V_t]w_i + w_{i-1} - h^2\sqrt{8}\,V_t u_i$$

вычислялась сумма невязок в каждой точке численной схемы

$$N_s = \sum_i N_{si}, \qquad N_t = \sum_i N_{ti}.$$

Варьируя энергию связи (или k^2), проводилась минимизация значений всех невязок

$$\delta[|N_s(\kappa^2)| + |N_t(\kappa^2)|] = 0.$$

Энергия, т.е. k^2, дающая минимум невязок, считалась собственной энергией k_0^2, а функции u_0 и w_0, приводящие к этому минимуму - собственными функциями задачи, т.е. ВФ связанного состояния ядерной системы [4].

На основе приведенных выше выражений, на алгоритмическом языке "Basic", была написана компьютерная программа [5], которая использовалась для вычисления ядерных характеристик дейтрона и связанных состояний в $^4He^2H$ системе.

Программа тестировалась на нуклон - нуклонном потенциале Рейда [6], а сравнение результатов, полученных в его работе другими методами, с найденными по разработанной нами программе, приведены в табл.1.

Здесь E_d – энергия связи дейтрона в МэВ; R_d – среднеквадратичный радиус дейтрона в Фм; Q_d – квадрупольный момент дейтрона в Фм^2; P_d – вероятность D – состояния в дейтроне в %; A_s – асимптотическая константа S – волны; h – отношение асимптотических констант D и S волн; a_t – триплетная длина нуклон – нуклонного рассеяния в Фм; a_s – синглетная длина нуклон – нуклонного рассеяния в Фм; r_t – триплетный эффективный радиус нуклон – нуклонного рассеяния в Фм; r_s – синглетный эффективный радиус нуклон – нуклонного рассеяния в Фм.

Таблица 1. **Сравнение характеристик дейтрона и пр рассеяния**

Хар-ки дейтрона	Расчет Рейда	Наш Расчет
E_d, МэВ	2.22464	2.22458
Q_d, Фм²	0.2762	0.2757
P_d, %	6.217	6.217
A_S	0.87758	0.875(2)
$h=A_D/A_S$	0.02596	0.0260(2)
a_t, Фм	5.390	5.390
r_t, Фм	1.720	1.723
a_s, Фм	-17.1	-17.12
r_s, Фм	2.80	2.810
R_d, Фм	1.956	1.951

Из этих результатов видно, что отличие наших и предыдущих расчетов по энергии связанного состояния дейтрона имеет величину порядка нескольких тысячных процента. Такой вариационный метод сходится достаточно быстро, в течение нескольких минут на компьютере P4 3.0 Мгц, позволяет получать практически любую реальную точность, при использовании в программе двойной точности, и может применяться при решении любых задач на собственные значения для системы двух дифференциальных уравнений типа уравнения Шредингера.

Этот метод использовался для рассмотрения физических характеристик связанных состояний кластеров в легких атомных ядрах, в частности связанного состояния ^{2}H^{4}He кластеров с тензорными силами в атомном ядре ^{6}Li [7], и позволил получить новые физические результаты по описанию квадрупольного момента этого ядра.

Предложенный метод может быть использован для решения некоторых задач ядерной астрофизики при малых энергиях связанных состояний ядерных частиц.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Хюльтен Л., Сугавара М.* Проблема взаимодействия двух нуклонов. Строение атомного ядра. М.: ИЛ, 1959, С.9-98.

2. *Хойл Ф., Бербидж Е.М., Бербидж Дж.Р.* Ядерная астрофизика. М.: Мир, 1986, 519с.

3. *Михлин С.Г., Смолицкий Х.Л.* Приближенные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений. М.: Наука, 1965, 383с.

4. *Дубовиченко С.Б.* Методы расчета ядерных характеристик. Модели, методы, программы., Алматы, Комплекс, 2006, 311с.

5. *Дубовиченко С.Б.* Методы расчета и компьютерная программа для вычисления ядерных характеристик связанных состояний в потенциалах с тензорной компонентой. Алматы, Каз. Гос. ИНТИ, 1997, 29с.

6. *Reid R.V.* Local phenomenological nucleon - nucleon potentials. Ann. Phys. 1968. V.50. P.411-448.

7. *Дубовиченко С.Б., Неронов В.С.* Методы расчета ядерных фаз упругого рассеяния и энергий связанных состояний частиц в потенциалах с тензорной компонентой. Вестник Каз.АТиСО, 2006, №2, 20с.

Резюме

Потенциалдық кластерлік модельдегі атомдық ядролардың байланысты күйін талдау үшін қолданылған Шредингер теңдеуі немесе төменгі энергиялардың ядролық физикасы мен ядролық астрофизикасының есептеріндегі тензорлық күштермен осындай теңдеулер жүйесінің сандық шешім шығаруының кейбір стандартсыз әдістері қарастырылды.

Summary

Some non-standard methods of numerical solution of equation or system of Schredinger's equations with tensor forces in nuclear physics at low energies and nuclear astrophysics problems are considered. These methods can be applied for analysis of binding states of light atom nuclei in potential cluster model.

Астрофизический институт
им. В.Г. Фесенкова МОН РК
г. Алматы

Поступила 25.04.07.