

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Application 2

Трехтельная модель ядра ${}^9\text{Be}$

Three - body model of the ${}^9\text{Be}$ nucleus

Введение

В этом приложении рассмотрены математические методы решения трехчастичной вариационной задачи дискретного спектра с разложением волновой функции по неортогональному гауссовому базису при независимом варьировании параметров. Кратко приведены математические методы с использованием, изложенного во второй главе, альтернативного способа, который приводит к устойчивому алгоритму решения обобщенной матричной задачи на собственные значения и функции.

Описанные методы применяются к рассмотрению некоторых характеристик связанного состояния ядра ${}^9\text{Be}$ в трехчастичной модели и описанию его фоторазвала в двухчастичный ${}^3\text{H}^6\text{Li}$ канал. В области энергий γ - квантов до 35 МэВ удастся хорошо описать имеющиеся экспериментальные данные.

Рассматриваемые здесь теоретические результаты, получаемые на основе трехтельного подхода, могут представлять определенный интерес для некоторых задач ядерной астрофизики, поскольку основаны на микроскопическом подходе, объясняющем природу некоторых термоядерных процессов, а именно, фоторазвала ядра ${}^9\text{Be}$ в ${}^3\text{H}^6\text{Li}$ канал при низких энергиях.

Трехтельная модель позволяет провести определенную проверку, полученных по фазам рассеяния парных межкластерных потенциалов и убедиться в целесообразности их дальнейшего использования для расчетов, связанных с рассмотрением других астрофизических характеристик ядерных систем при низких и сверхнизких энергиях.

П2.1 Постановка задачи в трехтельной модели

В работах [236,237,238,239] были подробно рассмотрены возможности трехтельной модели ядра ${}^6\text{Li}$ и показана ее способность правильно описывать почти все наблюдаемые характеристики этого ядра, включая продольные электромагнитные формфакторы. Проведенная в дальнейшем антисимметризация ВФ [240] позволила существенно улучшить качество описания и поперечных формфакторов, почти не изменяя другие характеристики этого ядра.

Эти результаты могут объяснить определенные успехи простых двухкластерных моделей легких ядер с запрещенными состояниями, в частности, ${}^2\text{H}^4\text{He}$ и ${}^3\text{H}^4\text{He}$ моделей ядер ${}^6\text{Li}$ и ${}^7\text{Li}$, в которых получается хорошее описание многих экспериментальных характеристик, но плохо воспроизводятся поперечные формфакторы при больших переданных импульсах [241,242].

Антисимметризация ВФ, выполненная в работе [240], затрагивает, в основном, внутреннюю область ядра и заметно изменяет волновую функцию только на малых расстояниях. Именно эта область расстояний определяет поведение высокоимпульсной компоненты поперечных формфакторов. Область больших расстояний меняется мало, что не приводит к существенным изменениям других расчетных характеристик, зависящих в основном от поведения волновой функции периферийной области ядра.

Поэтому, вполне можно предположить, что проведение антисимметризации волновой функции в двухкластерной ${}^2\text{H}^4\text{He}$ модели с тензорными силами ядра ${}^6\text{Li}$, которая позволяет описать его квадрупольный момент [177,243], может заметно улучшить описание и поперечных формфакторов при больших переданных импульсах.

Ядро ${}^7\text{Li}$, несмотря на вполне успешное описание многих его характеристик на основе простой двухкластерной модели [87], можно рассматривать как трехтельную ${}^2\text{H}^4\text{He}$ систему, которая, в принципе, имеет больше возможностей и даже позволяет выделять различные двухчастичные каналы [20].

Трехтельная модель может использоваться и для более тяжелых ядер, например, ${}^9\text{Be}$. Обычно при рассмотрении ${}^9\text{Be}$, исходная волновая функция этого ядра выбиралась в $n^4\text{He}^4\text{He}$ мультикластерной динамической модели с Паули проектированием [244]. Полученные радиальные функции в канале ${}^9\text{Be}(n^4\text{He}^4\text{He}) \rightarrow {}^6\text{Li}({}^4\text{He}n p) + {}^3\text{H}$ соответствуют $3P$ функциям трансляционно - инвариантной модели оболочек, т.е. имеют узловое поведение.

Кроме того, имеет смысл рассмотреть и возможность построения модели ядра ${}^9\text{Be}$ в ${}^4\text{He}^3\text{H}^2\text{H}$ представлении. В целом понятно, что в силу малости энергии связи в $n^4\text{He}^4\text{He}$ канале ($Q = -1.573$ МэВ), конфигурация $n^4\text{He}^4\text{He}$ является более “диффузной” по сравнению с ${}^4\text{He}^3\text{H}^2\text{H}$ системой, которая связана на порядок сильнее ($Q = -19.16$ МэВ).

Таким образом, не очевидно, что в рамках ${}^4\text{He}^3\text{H}^2\text{H}$ модели ядра ${}^9\text{Be}$ возможно хорошее описание каналов с излучением нейтрона или α - частицы. В то же время, представляется интересным исследовать, в едином последовательном подходе на основе ${}^4\text{He}^3\text{H}^2\text{H}$ модели, сильно связанные каналы ${}^9\text{Be} \rightarrow {}^6\text{Li} + {}^3\text{H}$ и ${}^9\text{Be} \rightarrow {}^7\text{Li} + {}^2\text{H}$.

Далее мы более подробно остановимся на двухчастичном канале ${}^6\text{Li} + {}^3\text{H}$ ядра ${}^9\text{Be}$ и представим результаты расчетов волновой функции ${}^9\text{Be}$ в ${}^4\text{He}^3\text{H}^2\text{H}$ одноканальном приближении, предложенном ранее в работе [245]. Полученные ВФ будут спроектированы на кластерный канал ${}^6\text{Li} + {}^3\text{H}$ и апробированы в расчетах характеристик фотоядерной реакции ${}^9\text{Be}(\gamma, {}^3\text{H}){}^6\text{Li}$ [246] в сравнении с расчетами для $n^4\text{He}^4\text{He}$ модели этого ядра.

Но вначале кратко обсудим элементы формальных методов расчета ${}^4\text{He}^3\text{H}^2\text{H}$ функций в одноканальном приближении. В расчетах трехкластерных ВФ в одноканальном приближении задействован только один потенциал для определенной парциальной волны в каждом плече парного межкластерного взаимодействия. А для нахождения энергии связи такой системы используются радиальные функции, представленные разложением по гауссовому базису.

П2.2 Обобщенная задача на собственные значения

Рассмотрим радиальное уравнение Шредингера с центральными ядерными силами для волновой функции системы трех частиц [244]

$$(H - E)\Phi_{l,\lambda}(r,R) = 0 . \quad (\text{П2.1})$$

где

$$H = T + V , \quad T = T_1 + T_2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{\hbar^2}{2\mu_0}\Delta_R ,$$

$$V = V_{12} + V_{23} + V_{13} , \quad (\text{П2.2})$$

$$\mu = \frac{m_2 m_3}{m_{23}} , \quad \mu_0 = \frac{m_1 m_{23}}{m} ,$$

$$m_{23} = m_2 + m_3 , \quad m = m_1 + m_2 + m_3 .$$

Здесь m и μ – массы и приведенные массы частиц, Δ – оператор Лапласа, \hbar^2 – постоянная Планка, T и V – операторы кинетической и потенциальной энергии, H – гамильтониан и E – энергия системы.

Величина r в такой записи определяет расстояние между частицами 2 и 3, которые находятся в основании треугольника из трех тел с орбитальным моментом λ , а R – это расстояние между первой частицей, которая расположена в вершине треугольника и центром масс первых двух частиц с орбитальным моментом l .

Полная трехтельная волновая функция в таком случае имеет вид

$$\Psi(r, R) = \sum_{l,\lambda} \Phi_{l,\lambda}(r, R) Y_{LS}^{JM}(\hat{r}, \hat{R}) ,$$

где ее угловая часть записывается

$$Y_{LS}^{JM}(\hat{r}, \hat{R}) = \sum_{M_S M_L} \langle LM_L SM_S | JM \rangle Y_{LM_L}(\hat{r}, \hat{R}) \chi_{SM_S}(\sigma) .$$

Здесь $L = 1 + \lambda$ – орбитальный момент, S – спин, J – полный момент системы частиц, M – их проекции, Y_{LS}^{JM} – спин-угловая функция, $\Phi_{l,\lambda}$ – радиальная волновая функция, r и R – скалярные расстояния между частицами, \hat{r} и \hat{R} – углы между направлениями векторов \mathbf{r} и \mathbf{R} и осью z , Y_{LM} – сферическая функция, χ_{SM} – спиновая функция системы, зависящая от спина σ , угловые скобки обозначают коэффициенты Клебша-Гордона.

Напомним далее, что радиальная волновая функция записывается в форме разложения по гауссоидам и может быть представлена в следующем виде:

$$\Phi_{l,\lambda}(r, R) = N r^\lambda R^l \sum_i C_i \exp(-\alpha_i r^2 - \beta_i R^2) = N \sum_i C_i \Phi_i . \quad (\text{П2.3})$$

Выражение

$$\Phi_i = r^\lambda R^l \exp(-\alpha_i r^2 - \beta_i R^2)$$

называется базисной функцией.

Подставляя разложение (П2.3) в уравнение (П2.1), домножая (П2.1) слева на базисную функцию Φ_j и интегрируя по всем переменным, приводим (П2.1) к матричному виду

$$\sum_i (H_{ij} - E L_{ij}) C_i = 0$$

или

$$K(E)C = 0 , \quad (\text{П2.4})$$

где матрица $K(E)$ определяется как

$$K(E) = H - EL .$$

В этих выражениях H – матрица гамильтониана, L – матрица интегралов перекрывания, которая при использовании ортогонального базиса переходит в единичную матрицу I . Отметим, что матрица K недиагональна по энергии и вместо обычной задачи на собственные значения мы имеем обобщенный вариант этой задачи, методы решения которой были рассмотрены во второй главе. Здесь напомним только основные принципы этого метода.

Поскольку уравнение (П2.4) однородное, оно будет иметь нетривиальные решения только тогда, когда детерминант матрицы K равен нулю. Условие равенства нулю ее детерминанта позволяет найти все собственные значения E системы (при заранее заданных параметрах α_i и β_i), а по ним все собственные вектора C , а значит и саму радиальную функцию $\Phi_{l,\lambda}$ в выражении (П2.3).

В реальных расчетах при каждом значении вариационных параметров α_i и β_i находим некоторую энергию системы (которая дает ноль детерминанта), а затем, варьируя эти параметры, проводим поиск минимума этой энергии, которая является собственной энергией задачи. Затем увеличиваем размерность базиса N и повторяем все вычисления, до тех пор, пока величина собственного значения, т.е. энергия связи E_N , на очередном шаге N не станет отличаться от предыдущего значения E_{N-1} на величину ϵ , которая обычно задается на уровне $0.1 \div 1.0\%$. В соответствии с теоремой Хилерааса - Ундгейма [78] эта минимальная энергия и будет реальной энергией связи трехчастичной системы, т.е. энергией связи атомного ядра в рассматриваемой модели.

П2.3 Вариационные методы трехтельной модели

Матричные элементы гамильтониана системы и инте-

гралов перекрывания, вычисленные по базисным функциям Φ_i , имеют вид [245,247]

$$T_{ij} = \frac{\pi}{16} N^2 \frac{\hbar^2}{m_N} \frac{(2l+1)!!(2\lambda+1)!!}{2^{l+\lambda}} \alpha_{ij}^{-\lambda-1/2} \beta_{ij}^{-l-1/2} G_{ij} \quad ,$$

$$G_{ij} = \frac{B_{ij}(\alpha, \lambda)}{\mu \beta_{ij}} + \frac{B_{ij}(\beta, l)}{\mu_0 \alpha_{ij}} \quad ,$$

$$B_{ij}(\delta, \nu) = \frac{\nu^2}{2\nu+1} + \frac{\delta_i \delta_j}{\delta_{ij}^2} (2\nu+3) - \nu \quad ,$$

$$L_{ij} = \frac{\pi}{16} N^2 \frac{(2l+1)!!(2\lambda+1)!!}{2^{l+\lambda}} \alpha_{ij}^{-\lambda-3/2} \beta_{ij}^{-l-3/2} \quad ,$$

$$N = \left(\sum_{ij} C_i C_j L_{ij} \right)^{-1/2} \quad ,$$

с потенциалами

$$[(V_{\mu\bar{0}})_R]_{ij} = \frac{\pi}{16} N^2 \frac{\hbar^2}{\mu_0} l(l+1) \frac{(2l-1)!!(2\lambda+1)!!}{2^{l+\lambda}} \alpha_{ij}^{-\lambda-3/2} \beta_{ij}^{-l-1/2} \quad ,$$

$$[(V_{\mu\bar{0}})_r]_{ij} = \frac{\pi}{16} N^2 \frac{\hbar^2}{\mu} \lambda(\lambda+1) \frac{(2\lambda-1)!!(2l+1)!!}{2^{l+\lambda}} \alpha_{ij}^{-\lambda-1/2} \beta_{ij}^{-l-3/2} \quad ,$$

$$[\{V_k(23)\}_r]_{ij} = Z_2 Z_3 \frac{\pi}{16} N^2 \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{(2l+1)!!}{2^l} \frac{\lambda!}{\alpha_{ij}^{\lambda+1} \beta_{ij}^{l+3/2}} \quad ,$$

$$[\{V_k(12)\}_R]_{ij} = Z_1 Z_2 \frac{\pi}{16} N^2 \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{(2\lambda+1)!!}{2^\lambda} \frac{l!}{\beta_{ij}^{l+1} \alpha_{ij}^{\lambda+3/2}}$$

$$[V_k(13)]_{ij} = Z_1 Z_3 \frac{\pi}{16} N^2 \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{(2\lambda + 1)!!}{2^\lambda} \frac{l!}{\beta_{ij}^{l+1} \alpha_{ij}^{\lambda+3/2}}$$

$$(V_{23})_{ij} = \frac{\pi}{16} N^2 V_{23} \frac{(2l+1)!!(2\lambda+1)!!}{2^{l+\lambda}} (\alpha_{ij} + \gamma_{23})^{-\lambda-3/2} \beta_{ij}^{-l-3/2} ,$$

$$\alpha_{ij} = \alpha_i + \alpha_j , \quad \beta_{ij} = \beta_i + \beta_j .$$

Далее, например, при значениях $l = 1$ и $\lambda = 0$ имеем следующие выражения для матричных элементов от ядерных потенциалов

$$(V_{12})_{ij} = \frac{\pi}{16} N^2 \frac{3V_{12}}{2A_{ij}^{3/2} (\beta_{ij} + \gamma_{12})} \left[\frac{a^2 \gamma_{12}^2}{A_{ij}} + 1 \right] ,$$

где

$$A_{ij} = \alpha_{ij} \beta_{ij} + \gamma_{12} (\alpha_{ij} + a^2 \beta_{ij}) , \quad a = m_3/m_{23} .$$

В случае $l = 0$ и $\lambda = 0$ для этой части потенциала находим выражение

$$(V_{12})_{ij} = \frac{\pi}{16} N^2 \frac{V_{12}}{A_{ij}^{3/2}} .$$

Здесь величина γ_{12} является параметром ширины гауссового потенциала, а V_{12} – его глубина между соответствующей парой частиц, в данном случае, 12 или 13.

Для случая произвольных l , когда $\lambda = 0$ можно получить выражение

$$(V_{12})_{ij} = \frac{\pi}{16} N^2 V_{12} \frac{(2l+1)!!}{2^l} \frac{d_{ij}^l}{A_{ij}^{l+3/2}} ,$$

где

$$d = \alpha_{ij} + \gamma_{12} a^2 .$$

Среднеквадратичный массовый радиус ядра в такой модели представляется в виде [245,248]

$$\langle r^2 \rangle_m = m_1 / m \langle r^2 \rangle_{m_1} + m_2 / m \langle r^2 \rangle_{m_2} + m_3 / m \langle r^2 \rangle_{m_3} + A / m$$

$$A = \frac{\pi}{16} N^2 \frac{(2l+1)!!(2\lambda+1)!!}{2^{l+\lambda+1}} \sum_{i,j} C_i C_j \alpha_{ij}^{-\lambda-3/2} \beta_{ij}^{-l-3/2} \left(\frac{2\lambda+3}{\alpha_{ij}} \mu + \frac{2l+3}{\beta_{ij}} \mu_0 \right)$$

$$\mu = \frac{m_2 m_3}{m_{23}}, \quad \mu_0 = \frac{m_1 m_{23}}{m},$$

$$m_{23} = m_2 + m_3, \quad m = m_1 + m_2 + m_3 .$$

Квадрупольный момент ядра с учетом момента дейтрона записывается [20]

$$Q = Q_d - \frac{2}{5} B ,$$

$$B = \frac{\pi}{16} N^2 \frac{(2l+1)!!(2\lambda+1)!!}{2^{l+\lambda+1}} \sum_{i,j} C_i C_j \alpha_{ij}^{-\lambda-3/2} \beta_{ij}^{-l-3/2} \left(\frac{2l+3}{\beta_{ij}} C + \frac{2\lambda+3}{\alpha_{ij}} D \right) +$$

$$+ N^2 E \sum_{i,j} C_i C_j \frac{(\lambda+1)!(l+1)!}{2\alpha_{ij}^{\lambda+2} \beta_{ij}^{l+2}} ,$$

$$C = \frac{Z_1 m_{23}^2 + Z_{23} m_1^2}{m^2} , \quad D = \frac{Z_2 m_3^2 + Z_3 m_2^2}{m_{23}^2} ,$$

$$E = \frac{m_1}{mm_{23}}(Z_3 m_2 - Z_2 m_3), \quad Z_{23} = Z_1 + Z_2 \quad .$$

Среднеквадратичный зарядовый радиус ядра в трехтельной модели имеет вид

$$\langle r^2 \rangle_z = Z_1 / Z \langle r^2 \rangle_{z_1} + Z_2 / Z \langle r^2 \rangle_{z_2} + Z_3 / Z \langle r^2 \rangle_{z_3} + B / Z$$

Здесь величина B определена в описании квадрупольного момента.

В качестве зарядовых и массовых радиусов кластеров принимались величины $\langle r \rangle_{md} = \langle r \rangle_{zd} = 1.96$, $\langle r \rangle_{mt} = \langle r \rangle_{zt} = 1.70$ Фм, $\langle r \rangle_{m\alpha} = \langle r \rangle_{z\alpha} = 1.67$ Фм [249,250,251]. Заметим, что некоторые из них несколько отличаются от величин, использованных нами в табл.3.2.

При поиске энергии связи ядра в трехтельной модели начальные значения вариационных параметров α_i и β_i находились из линейной сетки вида

$$\alpha_i = i/30 \quad , \quad \beta_i = 2\alpha_i \quad .$$

Затем проводилось независимое варьирование каждого из них так, чтобы минимизировать энергию системы с точностью до $0.1 \div 1.0\%$, т.е. параметры изменяются до тех пор, пока изменение энергии не станет меньше этой, заранее заданной величины.

Для проверки предложенного метода расчета и компьютерной программы рассматривалась модельная задача для трех частиц, взаимодействующих в потенциале Аффана - Танга [252] с усреднением триплетных и синглетных состояний. Для энергии связи такой системы в [252] получено -7.74 МэВ, а в работах [253], где использовался неортогональный вариационный метод с изменением параметров α и β волновой функции на основе тангенциальной сетки, найдено -7.76 МэВ. Нами, на основе изложенных методов, при независимом варьировании всех параметров и размерности базиса $N =$

5, получено -7.83 МэВ, т.е. энергия связи такой системы изменилась примерно на 1% относительно результатов работ [252,253].

В этих расчетах задавались целые значения масс частиц, а константа \hbar^2 / m_0 принималась равной 41.4686 МэВ·Фм². Кулоновский параметр и кулоновский потенциал определены во второй главе.

П2.4 Трехтельная кластерная модель ядра ⁹Ве

Перейдем теперь к более подробному рассмотрению ядра ⁹Ве в трехтельной кластерной ⁴He³H²H модели. Будем считать, что в основании треугольника из трех частиц находятся ³H²H кластеры (частицы 23) с радиус - вектором относительного расстояния $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{23}$ и орбитальным моментом относительного движения λ .

Ядро ⁴He (частица 1) находится в вершине треугольника и его положение относительно центра масс двухкластерной системы определяется радиус - вектором $\mathbf{R} = \mathbf{R}_{(23),1}$ и орбитальным моментом l . Полный орбитальный момент системы $L = l + \lambda$, равный 1, может быть получен из комбинации $l = 1$ и $\lambda = 0$. Предполагается, что именно эта орбитальная конфигурация доминирует в рассматриваемой ⁴He³H²H модели, т.е. рассматривается одноканальная трехтельная модель этого ядра.

В расчетах использованы бинарные межкластерные потенциалы с отталкивающим кором для ⁴He³H и ⁴He²H систем и периферическим отталкиванием и запрещенным состоянием для ³H²H системы следующего вида

$$V(r) = V_1 \exp(-\gamma r^2) + V_2 \exp(-\delta r^2) .$$

Параметры межкластерных парных потенциалов приведены ниже в табл.П2.1.

Табл.П2.1. Параметры потенциалов в бинарных кластерных

системах и основные характеристики их связанных состояний.

Сис-тема	L_J	V_1 , МэВ	γ , Φ_M^{-2}	V_2 , МэВ	δ , Φ_M^{-2}	E , МэВ	$\langle r^2 \rangle^{1/2}$, Φ_M	C_w
1	2	3	4	5	6	7	8	9
${}^4\text{He}{}^3\text{H}$	${}^2P_{1/2}$	-85,82	0,13	90	0,2	-1.989	2,6(2)	3.865(5)
${}^4\text{He}{}^2\text{H}$	3S_1	-71,9	0,15	70	0,2	-1.472	2.61(5)	3.275(5)
${}^3\text{H}{}^2\text{H}$	${}^2S_{1/2}$	-44, 5887	0,15	4,5	0,015	—	—	—

Здесь во втором столбце приведен орбитальный момент для каждой пары кластеров. Параметры потенциалов подобраны таким образом, чтобы максимально точно воспроизвести соответствующие экспериментальные фазы упругого рассеяния, которые показаны на рис.П2.1 ÷ П2.3.

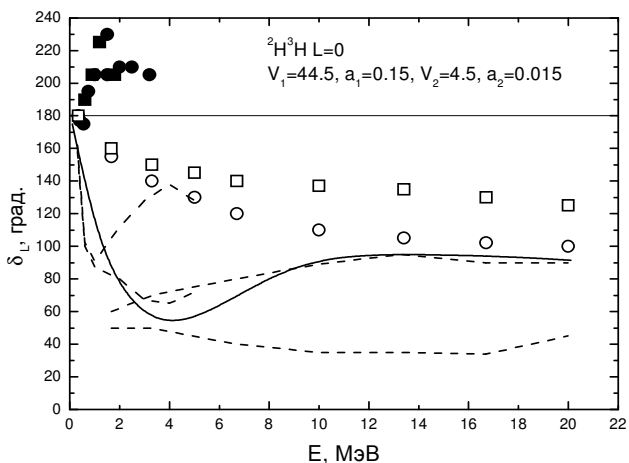


Рис.П2.1. Чистые фазы упругого ${}^3\text{H}{}^2\text{H}$ рассеяния для S -волны. Пунктиром приведена полоса ошибок определения чистых фаз [87], которая получается из данных экспериментальных работ [255]. Точки и квадраты – извлеченные из экспериментальных данных фазы рассеяния [255]. Кружки и открытые квадраты – МРГ вычисления фаз рассеяния [254].

В седьмом столбце табл.П2.1 приведены каналные энергии связи, в восьмом – среднеквадратичные радиусы связанного состояния пары частиц и в девятом – асимптотические константы связанных состояний в двухчастичных каналах, найденные с функцией Уиттекера. В качестве потенциалов ${}^3\text{H}^2\text{H}$ системы использованы чистые по схемам Юнга взаимодействия [87], а результаты расчета фаз с таким потенциалом показаны на рис.П2.1 непрерывной линией. Пунктиром на рис.П2.1 приведена полоса ошибок определения чистых ${}^3\text{H}^2\text{H}$ фаз, которая получается из экспериментальных данных различных исследований, описанных в [255].

Такой потенциал содержит связанное запрещенное состояние при энергии -11.49 МэВ. Отметим, что не удастся найти другие параметры потенциала, без связанного запрещенного уровня, с которыми можно было бы описать чистую дублетную S - фазу рассеяния.

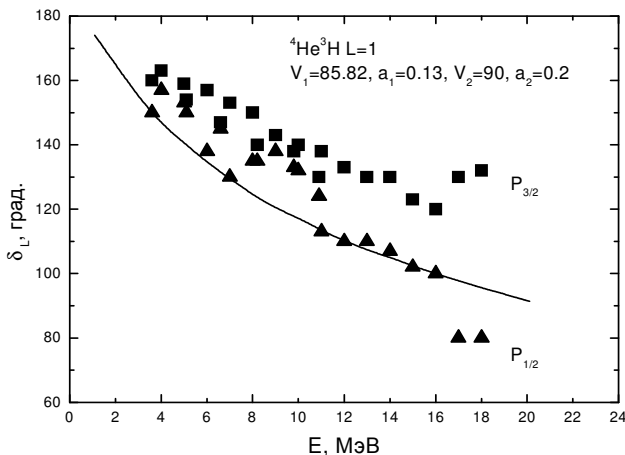


Рис.П2.2. Фазы упругого ${}^4\text{He}^3\text{H}$ рассеяния для P - волны. Треугольники и квадраты – извлеченные из экспериментальных данных фазы рассеяния [172].

Для ${}^4\text{He}^3\text{H}$ системы использован потенциал первого возбужденного $P_{1/2}$ состояния (непрерывная линия на рис.П2.2)

без ЗС, который хорошо описывает фазу рассеяния [172] и приводит, как нам кажется, к наилучшему описанию характеристик ядра ${}^9\text{Be}$ в трехчастичной модели. Тем самым, оказывается, что кластерная ${}^4\text{He}^3\text{H}$ система находится внутри ядра ${}^9\text{Be}$ в виртуальном возбужденном $P_{1/2}$ состоянии, а не основном $P_{3/2}$ уровне. Возможно, в будущем этот результат можно будет проверить другими, независимыми методами или подходами.

Потенциал в ${}^4\text{He}^2\text{H}$ системе наилучшим образом описывает характеристики связанного состояния ядра ${}^6\text{Li}$, приведенные в табл.П2.1, и не имеет ЗС, а качество описания S -фазы рассеяния [173,174] показано на рис.П2.3 непрерывной линией.

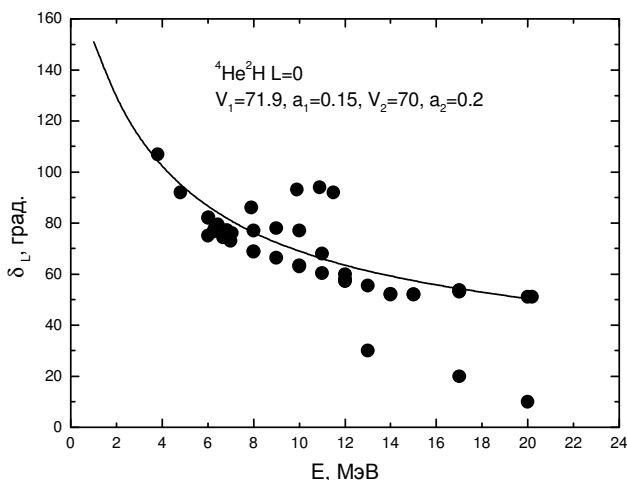


Рис.П2.3. Фазы упругого ${}^4\text{He}^2\text{H}$ рассеяния для S -волны. Точки и квадраты – извлеченные из экспериментальных данных фазы рассеяния [173,174].

С описанными выше парными потенциалами найдена энергия связи ядра ${}^9\text{Be}$ и его зарядовый радиус R_z . Некоторые характеристики трехчастичного связанного состояния ${}^9\text{Be}$ даны в табл.П2.2, вместе с параметрами разложения трехтельной волновой функции. Как видно из этой таблицы, по-

лученные величины хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными, а нормировка трехтельной ВФ практически равна единице.

На рис.П2.4а, П2.4б показано сравнение радиальных функций ${}^3\text{H}+{}^6\text{Li}$ относительного движения построенных в $n^4\text{He}^4\text{He}$ и ${}^4\text{He}^3\text{H}^2\text{H}$ моделях соответственно. Использование потенциалов с отталкиванием в одноканальной ${}^2\text{H}^3\text{H}^4\text{He}$ модели ${}^9\text{Be}$ приводит нас к без узловой $1P$ ВФ относительного движения. В то время как, $n^4\text{He}^4\text{He}$ модель, построенная с потенциалами глубокого притяжения, дает узловую $3P$ волновую функцию (сплошная кривая на рис.П2.4а соответствует результирующей волновой функции). Полученные волновые функции использованы далее в расчетах сечений фото-развала ядра ${}^9\text{Be}(\gamma, {}^3\text{H}){}^6\text{Li}$ [256], которые представлены на рис.П2.5.

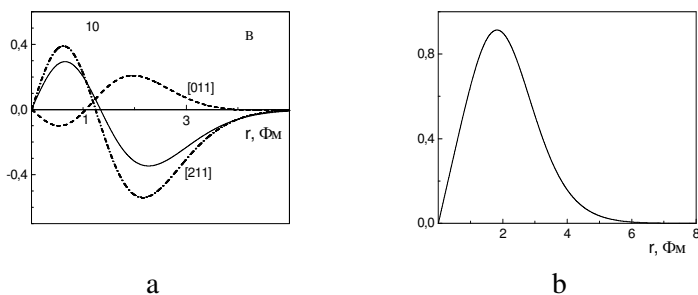


Рис.П2.4. Радиальные функции относительного движения кластеров в канале ${}^6\text{Li}+{}^3\text{H}$ ядра ${}^9\text{Be}$. а – $n^4\text{He}^4\text{He}$ модель; б – ${}^4\text{He}^3\text{H}^2\text{H}$ модель.

Табл.П2.2. Параметры трехтельной волновой функции, ее нормировка и характеристики ядра ${}^9\text{Be}$.

i	α_i	β_i
1	3.273095667111755E-001	8.983828859473847E-002
2	3.172872902170442	1.207723068311927E-001
3	1.844963898289113E-001	5.507018219497912E-002
4	9.153345511558431E-002	1.025123206313353E-001
5	2.213721392830491E-001	3.620573882275837E-001

6	2.269904002428514E-001	4.017242168731691E-001
7	1.985961231123472E-001	1.634388187790707E-001
8	5.073985961415315E-001	4.769549654021469E-001
9	5.124708157837092E-001	4.828596792375761E-001
10	3.843254062764651E-001	2.094550079909185E-001
i	C_i	
1	2.564677848067949E-002	
2	-2.825587985872606E-003	
3	3.379570860934880E-003	
4	1.204452338550613E-002	
5	-6.029327933110736E-001	
6	4.606318693160417E-001	
7	1.677085370227155E-001	
8	-3.310475484431805	
9	3.189208283959322	
10	1.415768198190696E-001	
Нормировка N	9.99999999999867E-001	
	Расчет	Эксперимент [137]
E , МэВ	-19.1632	-19.1633
R_Z , Фм	2.56	2.519(12)

Следует сразу отметить, что рассчитанные в этих двух подходах сечения практически не отличаются, хотя и имеют некоторые количественные расхождения. Это можно объяснить схожестью «хвоста» двух различных волновых функций (см. рис.П2.4) на больших расстояниях, т.е. при сравнительно малых энергиях процесса фоторазвала ${}^9\text{Be}(\gamma, {}^3\text{H}){}^6\text{Li}$.

Дальнейшее развитие теоретических исследований в этом направлении требует решения трехтельной задачи со связью каналов, т.е. учета различных возможных парциальных волн в каждом двухтельном плече трехчастичной системы. Поскольку рассмотренный подход позволяет правильно получать сечение процесса фоторазвала в измеренной области энергий, вполне естественно проводить вычисления и при энергиях γ - кванта стремящихся к нулю.

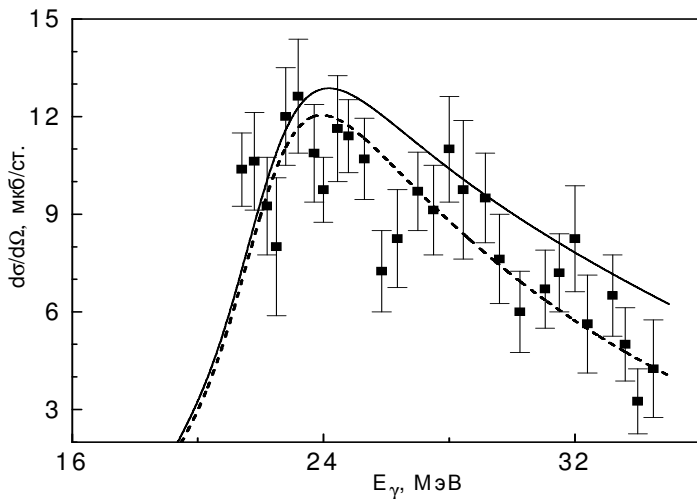


Рис.П2.5а. Дифференциальные сечения процесса ${}^9\text{Be}(\gamma, {}^3\text{H}){}^6\text{Li}$. Эксперимент работы [246]. Теоретический расчет для $n{}^4\text{He}{}^4\text{He}$ модели. Пунктир – дипольный $E1$ переход, сплошная кривая – суммарное сечение.

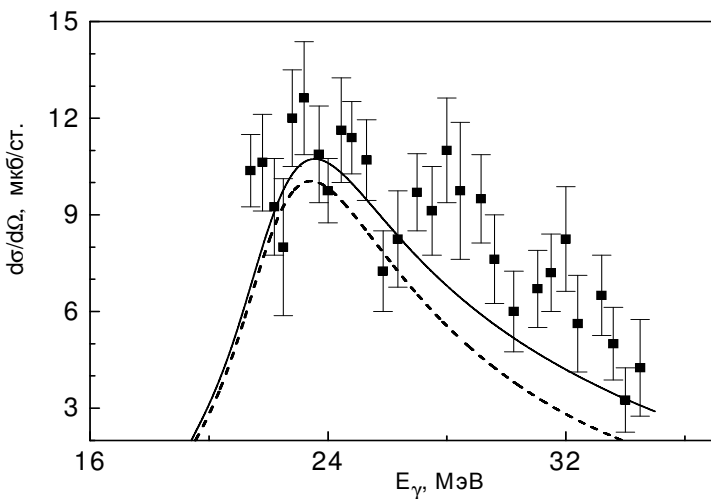


Рис.П2.5б. Дифференциальные сечения процесса ${}^9\text{Be}(\gamma, {}^3\text{H}){}^6\text{Li}$. Эксперимент работы [246]. Теоретический расчет для ${}^4\text{He}{}^3\text{H}{}^2\text{H}$ модели. Пунктир – дипольный $E1$ переход, сплошная кривая – суммарное сечение.

Таким образом, в рамках рассматриваемых вариационных методов, получены новые результаты для трехтельной ${}^2\text{H}{}^3\text{H}{}^4\text{He}$ модели ядра ${}^9\text{Be}$. Для этого использован неортогональный вариационный базис, независимое варьирование параметров, межкластерные потенциалы, чистые по схемам Юнга и согласованные с фазами упругого рассеяния в двухчастичных системах. Все эти результаты позволяют правильно воспроизвести рассмотренные характеристики связанного состояния ядра ${}^9\text{Be}$ и сечения некоторых фотоядерных процессов.

П2.5 Трехтельная вариационная программа

Приведем текст компьютерной программы для вычисления энергии связи ядра ${}^9\text{Be}$ в трехтельном ${}^4\text{He}{}^3\text{H}{}^2\text{H}$ канале. Программа основана на вариационном методе с разложением ВФ по неортогональному вариационному базису и независимым варьированием параметров, подробно описанном в работе [24].

Для написания текста программы использовался алгоритмический язык Fortran - 90 в системе PS - 4. Все основные параметры и переменные пояснены в распечатке программы или аналогичны, описанным ранее параметрам, для других компьютерных программ.

PROGRAM THREE_BODY_9Be

```
! ***** Программа расчета трехтельной энергии *****
IMPLICIT REAL(8) (A-Z)
INTEGER I,J,K,NF,NFF,NS,NI,NNP,NV,NSM,NP,NITER,NP2,
IJK,ITER
DIMENSION FF(0:500000),FU(0:500000),L(0:50,0:50),
PH5(0:50)
COMMON /M/
T(0:50,0:50),L1(0:50,0:50),XP(0:50),VN12(0:50,0:50),
VN13(0:50,0:50),VN23(0:50,0:50),VN231(0:50,0:50),
VN232(0:50,0:50),H(0:50,0:50),SV(0:50)
COMMON /A/ PM0,R122,PM23,A11,V122,M23,R121,V121,
```

R132,M3,M2,M1
COMMON /B/ R131,V131,HC,R232,V232,R231,V231,PI,
A23,A13,A12
COMMON /C/ PVC,EPP,ZYS,NSM,NS,V132,PNC,NEV
CHARACTER(9) FILI,FILO
! ***** Входные параметры *****
Z1=2.0D-000
Z2=1.0D-000
Z3=1.0D-000
M1=4.0D-000
M2=3.0D-000
M3=2.0D-000
RK1=1.670D-000
RK2=1.70D-000
RK3=1.960D-000
Z=Z1+Z2+Z3
M23=M3+M2
PM23=M3*M2/M23
AM0=M1+M2+M3
PM0=M1*M23/AM0
NF=6000; NFF=4; NS=1
HF=0.005D-000
PN=.50D-000
PH=.050D-000
NI=0; NNP=1; NV=0; NSM=0
BB=1.0D+030
HC=.010D-000
PNC=-20.0D-000
PVC=-10.0D-000
A11=41.46860D-000
A12=1.4399750D-000*Z1*Z2
A13=1.4399750D-000*Z1*Z3
A23=1.4399750D-000*Z3*Z2
P1=4.0D-000*DATAN(1.0D-000)
PI=DSQRT(P1)
! ***** Потенциалы *****
! 1 - AL; 2 - T; 3 - D; L - AL-T - 1, AL-D -0, D-T - 0
! D-T

```
V231=-44.5887D-000 ; ! J= 1 ; L=0
R231=.15D-000
V232=4.5D-000 ; ! J= 1 ; L=0
R232=0.015D-000
! AL-D
V131=-71.9D-000 ; ! J=1/2 ; L=0
R131=.15D-000
V132=70.0D-000 ; ! J=1/2 ; L=0
R132=0.2D-000
! AI-T
V121=-85.820D-000 ; ! J=1/2 ; L=1
R121=.13D-000
V122=90.0D-000 ; ! J=1/2 ; L=1
R122=0.2D-000
! ***** Параметры для варьирования *****
NP=10
FIL='ALFA9.DAT'
FILO='ALFA9.DAT'
OPEN (1,FILE=FILE)
READ(1,*)
DO I=1,NP
READ(1,*) J,XP(I),XP(I+NP)
ENDDO
CLOSE(1)
EP=1.0D-015; ! Точность энергии
EPP=2.0D-015; ! Точность детерминанта
NITER=1 ! Число итераций
PH=0.00001D-000
NP2=2*NP
! ***** Поиск минимума *****
AAA1: DO ITER=1,NITER
PH5=PH/ITER
50 FMIN=BB
DO IJK=1,NP2
PH5(IJK)=XP(IJK)*PH5
60 XP(IJK)=XP(IJK)+PH5(IJK)
IF (XP(IJK)<0.0D-000) THEN
XP(IJK)=XP(IJK)-PH5(IJK)
```

```
GOTO 61
ENDIF
CALL MINIM(NP,F)
CC=BB; BB=F
IF(F<CC)THEN
PRINT*, ITER,IJK,F,ABS(F-CC)
IF (ABS(F-CC)>=EP) GOTO 60
ELSE
XP(IJK)=XP(IJK)-PH5(IJK)
F=CC
ENDIF
61 ENDDO
PH5=-PH5/2.0D-000
IF (ABS(CC-F)>=EP/2.0D-000) GOTO 50
ENDDO AAA1
PRINT*, "*****"
PRINT*, "E = ",F
PRINT*
PRINT*, "      N      ALFA      BET"
DO I=1,NP
PRINT*,I,XP(I),XP(I+NP)
ENDDO
PRINT*
ZYS=1.0D-000
AA=F
CALL MINIM(NP,AA)
! ***** Нормировка функции *****
CN=-1.5D-000
BN=-2.5D-000
S=0.0D-000
DO I=1,NP
DO J=1,NP
AL=XP(I)+XP(J)
BT=XP(I+NP)+XP(J+NP)
L(I,J)=(AL**CN)*(BT**BN)
S=S+SV(I)*SV(J)*L(I,J)
ENDDO
ENDDO
```

```
ANOR=DSQRT(32.0D-000/3.0D-000/S)/PI
PRINT*
PRINT*,'      N      SV'
DO I=1,NP
SV(I)=ANOR*SV(I)
PRINT*,I,SV(I)
ENDDO
! ***** Проверка нормировки *****
S=0.0D-000
DO I=1,NP
DO J=1,NP
AL=XP(I)+XP(J)
BT=XP(I+NP)+XP(J+NP)
DO K=0,NF
R=HF*K
RR=(R**2)*AL
AB=(R**2)*DEXP(-RR)
FF(K)=AB
ENDDO
CALL SIMPS(NF,HF,FF,S1)
DO K=0,NF
R=HF*K
RR=(R**2)*BT
AC=(R**4)*DEXP(-RR)
FU(K)=AC
ENDDO
CALL SIMPS(NF,HF,FU,S2)
S=S+SV(I)*SV(J)*S1*S2
ENDDO
ENDDO
PRINT*
PRINT*, "NORM IZ INTEGRALA=",S
PRINT *,'NEV-DET = ',NEV
OPEN (1,FILE=FILO)
WRITE(1,*) '      N      ALFA      BETTA'
DO I=1,NP
WRITE(1,*) I,XP(I),XP(I+NP)
ENDDO
```

```

WRITE(1,*)
WRITE(1,*) 'E = ',F
WRITE(1,*)'SUM(H*SV-E*L*SV) FROM SV =',AA
WRITE(1,*)
WRITE(1,*) '      N      SV'
DO I=1,NP
WRITE(1,*) I,SV(I)
ENDDO
WRITE(1,*)
WRITE(1,*) 'NOR = ',S
WRITE(1,*)'NEV-DET = ',NEV
CLOSE(1)
! ***** Нормировка *****
CN=-1.5.0D-000
BN=-2.5.0D-000
SS=0. .0D-000
DO I=1,NP
DO J=1,NP
AL=XP(I)+XP(J)
BT=XP(I+NP)+XP(J+NP)
L(I,J)=AL**CN*BT**BN
SS=SS+SV(I)*SV(J)*L(I,J)
ENDDO
ENDDO
SSS=DSQRT(3.0D-000*P1/2.0D-000**5*SS)
PRINT*, "N IZ VIRAZHENIYA= ", SSS
! ***** Массовый радиус *****
S=0.0D-000
DO I=1,NP
DO J=1,NP
AL=XP(I)+XP(J)
BT=XP(I+NP)+XP(J+NP)
S=S+SV(I)*SV(J)*BT**BN*AL**CN*(3*PM23/AL+5*PM0/B
T)
ENDDO
ENDDO
RM=P1*3.0D-000*S/2. 0D-000**6
RRR=M1/AM0*RK1**2+M2/AM0*RK2**2+M3/AM0*RK3**

```

```
2+RM/AM0
RS=DSQRT(RRR)
PRINT*, "RM = ", RS
! ***** ENERGY *****
SS11=0. 0D-000
CN=-1.50D-000
BN=-2.50D-000
S=0. 0D-000
SS=0. 0D-000
SSS=0. 0D-000
SSDD=0. 0D-000
S123=0. 0D-000
S1=0. 0D-000
S3=0. 0D-000
S2=0. 0D-000
DO I=1,NP
DO J=1,NP
AL=XP(I)+XP(J)
BT=XP(I+NP)+XP(J+NP)
VK12A=2.0D-000*A12/PI/AL**(3.0D-000/2.0D-000)/BT**2
*P1/16.0D-000
VK13A=2.0D-000*A13/PI/AL**(3.0D-000/2.0D-000)/BT**2
*P1/16.0D-000
VK23A=3.0D-000*A23/PI/AL/BT**(5.0D-000/2.0D-000)
*P1/16.0D-000
VKA=(VK12A+VK13A+VK23A)
S=S+SV(I)*SV(J)*VKA
S1=S1+SV(I)*SV(J)*VK12A
S2=S2+SV(I)*SV(J)*VK13A
S3=S3+SV(I)*SV(J)*VK23A
VCB=A11*(AL*BT)**(-1.5)/PM0*P1/16.0D-000
SS=SS+SV(I)*SV(J)*VCB
AL1=XP(I)*XP(J)
BT1=XP(I+NP)*XP(J+NP)
H1=3.0D-000/2.0D-000*3.*A11*AL1/PM23*(AL*BT)**BN
H2=3.0D-000/2.0D-000*A11/PM0/(AL*BT)**(1.50D-000)*
(5.0D-000*BT1/BT**2-2.0D-000/3.0D-000)
TTT=(H1+H2)*P1/16.0D-000
```



```

SSS=SSS+SV(I)*SV(J)*TTT
ALB=3.0D-000/2.0D-000/BT*(AL*BT)**CN*P1/16.0D-000
SSDD=SSDD+SV(I)*SV(J)*ALB
AB=AL*BT+R121*(AL+(M3/M23)**2*BT)
BA=(M3/M23)**2*R121**2
VN12A=3.0D-000/2.0D-000*V121*(AB**CN)*(BA/AB+1.0D-
000)/(BT+R121)
AB=AL*BT+R122*(AL+(M3/M23)**2*BT)
BA=(M3/M23)**2*R122**2
VN12A=VN12A+3.0D-000/2.0D-
000*V122*(AB**CN)*(BA/AB+1.0D-000)/(BT+R122)
AB=AL*BT+R131*(AL+(M2/M23)**2*BT)
BA=(M2/M23)**2*R131**2
VN13A=3.0D-000/2.0D-000*V131*(AB**CN)
*(BA/AB+1)/(BT+R131)
AB=AL*BT+R132*(AL+(M2/M23)**2*BT)
BA=(M2/M23)**2*R132**2
VN13A=VN13A+3.0D-000/2.0D-000*V132
*(AB**CN)*(BA/AB+1.0D-000)/(BT+R132)
VN231T=3.0D-000/2.0D-000*V231*BT**BN*(AL+R231)**CN
VN232T=3.0D-000/2.0D-000*V232*BT**BN*(AL+R232)**CN
VN23T=VN231T+VN232T
S123=S123+SV(I)*SV(J)*(VN12A+VN13A+VN23T)*P1/16.0D
-000
ENDDO
ENDDO
SS11=SSS+S+SS+S123
PRINT*
PRINT*," COULOMB ENERGY = ",VK",S, "12",S1, "13",S2,
"23",S3
PRINT*," CENTRIFUGAL ENERGY= ",SS
PRINT*," KINETIC ENERGY= ",SSS
PRINT*," M.E. E* L1= ",SSDD
PRINT*," POTENTIAL ENERGY= ",S123
PRINT*," TOTAL ENERGY= ",SS11
END
SUBROUTINE SIMPS(N,H,F,S)
! ***** Подпрограмма интегрирования по Симпсону *****

```

```
IMPLICIT REAL(8) (A-Z)
INTEGER I,N
DIMENSION F(0:500000)
A=0.0D-000;B=0.0D-000
DO I=1,N-1,2
B=B+F(I)
ENDDO
DO I=2,N-2,2
A=A+F(I)
ENDDO
S=H*(F(0)+F(N)+2.0D-000*A+4.0D-000*B)/3.0D-000
END
SUBROUTINE MINIM(NP,ALA)
! ***** Подпрограмма матричных элементов *****
IMPLICIT REAL(8) (A-Z)
INTEGER NSM,NS,NP,KK,JJ
COMMON /M/ T(0:50,0:50),L1(0:50,0:50),XP(0:50),
VN12(0:50,0:50),VN13(0:50,0:50),VN23(0:50,0:50),
VN231(0:50,0:50),VN232(0:50,0:50),H(0:50,0:50),SV(0:50)
COMMON /A/
PM0,R122,PM23,A11,V122,M23,R121,V121,R132,M3,M2,M1
COMMON /B/
R131,V131,HC,R232,V232,R231,V231,PI,A23,A13,A12
COMMON /C/ PVC,EPP,ZYS,NSM,NS,V132,PNC,NEV
CN=-1.5D-000
BN=-2.5D-000
A1: DO KK=1,NP
A5: DO JJ=KK,NP
AL=XP(KK)+XP(JJ)
AL1=XP(KK)*XP(JJ)
BT=(XP(KK+NP)+XP(JJ+NP))
BT1=XP(KK+NP)*XP(JJ+NP)
H1=3.0D-000/2.0D-000*3.0D-
000*A11*AL1/PM23*(AL*BT)**BN
H2=3.0D-000/2.0D-000*A11/PM0/(AL*BT)**(1.5)*(5.0D-
000*BT1/BT**2-2.0D-000/3.0D-000)
T(KK,JJ)=H1+H2
L1(KK,JJ)=3.0D-000/2.0D-000/BT*(AL*BT)**CN
```

```

AA=AL*BT+R121*(AL+BT*(M3/M23)**2)
BB=((M3/M23)**2)*(R121**2)
VN12(KK,JJ)=3.0D-000/2.0D-
000*V121*(AA**CN)*(BB/AA+1.0D-000)/(BT+R121)
AA=AL*BT+R122*(AL+BT*(M3/M23)**2)
BB=((M3/M23)**2)*(R122**2)
VN12(KK,JJ)=VN12(KK,JJ)+3.0D-000/2.0D-
000*V122*(AA**CN)*(BB/AA+1.0D-000)/(BT+R122)
AA=AL*BT+R131*(AL+BT*(M2/M23)**2)
BB=((M2/M23)**2)*(R131**2)
VN13(KK,JJ)=3.0D-000/2.0D-
000*V131*(AA**CN)*(BB/AA+1.0D-000)/(BT+R131)
AA=AL*BT+R132*(AL+BT*(M2/M23)**2)
BB=((M2/M23)**2)*(R132**2)
VN13(KK,JJ)=VN13(KK,JJ)+3.0D-000/2.0D-
000*V132*(AA**CN)*(BB/AA+1.0D-000)/(BT+R132)
VN231(KK,JJ)=3.0D-000/2.0D-
000*V231*(BT**BN)*((AL+R231)**CN); ! L=1, LAM=0
VN232(KK,JJ)=3.0D-000/2.0D-
000*V232*(BT**BN)*((AL+R232)**CN); ! L=1, LAM=0
VN23(KK,JJ)=VN231(KK,JJ)+VN232(KK,JJ)
VK12=2.0D-000*A12/PI/AL**(3.0D-000/2.0D-000)/BT**2
VK13=2.0D-000*A13/PI/AL**(3.0D-000/2.0D-000)/BT**2
VK23=3.0D-000*A23/PI/AL/BT**(5.0D-000/2.0D-000)
VCB=A11*(AL*BT)**CN/PM0
H(KK,JJ)=T(KK,JJ)+VN23(KK,JJ)+VN12(KK,JJ)+VN13(KK,JJ)
)+VCB+VK12+VK13+VK23
H(JJ,KK)=H(KK,JJ)
L1(JJ,KK)=L1(KK,JJ)
ENDDO A5
ENDDO A1
IF (ZYS==1.0D-000) THEN
CALL VEC(NP,ALA)
RETURN
ENDIF
CALL MINI(NP,ALA,DETER)
END
SUBROUTINE MINI(NP,COR,D)

```

! ***** Подпрограмма минимизации *****

```
IMPLICIT REAL(8) (A-Z)
INTEGER C,NSM,NS,NP
COMMON /A/ PM0,R122,PM23,A11,V122,M23,R121,V121,
R132,M3,M2,M1
COMMON /B/ R131,V131,HC,R232,V232,R231,V231,PI,
A23,A13,A12
COMMON /C/ PVC,EPP,ZYS,NSM,NS,V132,PNC,NEV
PN=PNC; PV=PVC; H=HC; E=EPP
IF(PN>PV) THEN
PNN=PV; PV=PN; PN=PNN
ENDIF
A=PN
1 CALL DET(NP,A,D1); B=A+H
2 CALL DET(NP,B,D2)
IF (D1*D2>0.0D-000) THEN
B=B+H; D1=D2
IF (B<=PV .AND. B>=PN) GOTO 2
C=0; RETURN; ELSE
A=B-H; H=H*1.0D-001
IF(ABS(D2)<E .OR. ABS(H)<E) GOTO 3
B=A+H; GOTO 1
ENDIF
3 C=1; COR=B; D=D2
END
```

SUBROUTINE DET(NP,LLA,S)

! ***** Подпрограмма поиска детерминанта *****

```
IMPLICIT REAL(8) (A-Z)
INTEGER I,J,K,NP,NSM,NS
DIMENSION LLL(0:50,0:50),B(0:50,0:50),C(0:50,0:50),
AAA(0:50,0:50)
COMMON /M/ T(0:50,0:50),L1(0:50,0:50),XP(0:50),
VN12(0:50,0:50),VN13(0:50,0:50),VN23(0:50,0:50),
VN231(0:50,0:50),VN232(0:50,0:50),H(0:50,0:50),SV(0:50)
COMMON /A/ PM0,R122,PM23,A11,V122,M23,R121,V121,
R132,M3,M2,M1
COMMON /B/ R131,V131,HC,R232,V232,R231,V231,
PI,A23,A13,A12
```

```
COMMON /C/ PVC,EPP,ZYS,NSM,NS,V132,PNC,NEV
DO I=1,NP
DO J=1,NP
LLL(I,J)=(H(I,J)-LLA*L1(I,J))
B(I,J)=0.0D-000
C(I,J)=0.0D-000
ENDDO
ENDDO
GOTO 234
PRINT*, "           Матрица LLL=H-E*L1"
PRINT*
DO II=1,NP
DO KK=1,NP
PRINT*, LLL(II,KK)
ENDDO
PRINT*
ENDDO
234 CONTINUE
! ***** LLLL - Разложение на треугольные *****
DO I=1,NP
C(I,I)=1.0D-000
B(I,1)=LLL(I,1)
C(1,I)=LLL(1,I)/B(1,1)
ENDDO
DO I=2,NP
DO J=2,NP
S=0.0D-000
IF (J>I) GOTO 1
DO K=1,I-1
S=S+B(I,K)*C(K,J)
ENDDO
B(I,J)=LLL(I,J)-S
GOTO 2
1 S=0.0D-000
DO K=1,I-1
S=S+B(I,K)*C(K,J)
ENDDO
C(I,J)=(LLL(I,J)-S)/B(I,I)
```

```
2 CONTINUE
ENDDO
ENDDO
! ***** Проверка разложения матрицы LLL *****
SS=0.0D-000
DO I=1,NP
DO J=1,NP
S=0.0D-000
DO K=1,NP
S=S+B(I,K)*C(K,J)
ENDDO
AAA(I,J)=S-LLL(I,J)
SS=SS+AAA(I,J)
ENDDO
ENDDO
NEV=SS
GOTO 678
PRINT*, "          Для детерминанта  $N=LLL-B*C=0$ "
DO I=1,NP
PRINT*
DO J=1,NP
PRINT*,AAA(I,J)
ENDDO
ENDDO
PRINT*
678 CONTINUE
S=1.0D-000
DO K=1,NP
S=S*B(K,K)
ENDDO
goto 991
991 CONTINUE
22 FORMAT(3E15.5)
END
SUBROUTINE VEC(NP,LLA)
! ***** Подпрограмма для собственных векторов *****
IMPLICIT REAL(8) (A-Z)
INTEGER I,J,K,J1,I1,NP,NSM,NS
```

```
DIMENSION LLL(0:50,0:50),D(0:50),Y(0:50),B(0:50,0:50),
AD(0:50,0:50),X(0:50),C(0:50,0:50),E2(50)
COMMON /M/ T(0:50,0:50),L1(0:50,0:50),XP(0:50),
VN12(0:50,0:50),VN13(0:50,0:50),VN23(0:50,0:50),
VN231(0:50,0:50),VN232(0:50,0:50),H(0:50,0:50),SV(0:50)
COMMON /A/ PM0,R122,PM23,A11,V122,M23,R121,V121,
R132,M3,M2,M1
COMMON /B/ R131,V131,HC,R232,V232,R231,V231,PI,
A23,A13,A12
COMMON /C/ PVC,EPP,ZYS,NSM,NS,V132,PNC,NEV
DO I=1,NP
DO J=1,NP
LLL(I,J)=(H(I,J)-LLA*L1(I,J))
B(I,J)=0.0D-000
C(I,J)=0.0D-000
ENDDO
ENDDO
DO I=1,NP-1
DO J=1,NP-1
I1=I
J1=J
AD(I,J)=LLL(I1,J1)
ENDDO
ENDDO
I1=1
I2=NP-1
J=NP
DO I=I1,I2
D(I)=-LLL(I,J)
ENDDO
NP=NP-1
CALL TRI(NP,AD,B,C,SOB)
Y(1)=D(1)/B(1,1)
DO I=2,NP
S=0.0D-000
DO K=1,I-1
S=S+B(I,K)*Y(K)
ENDDO
```

```
Y(I)=(D(I)-S)/B(I,I)
ENDDO
X(NP)=Y(NP)
DO I=NP-1,1,-1
S=0.0D-000
DO K=I+1,NP
S=S+C(I,K)*X(K)
ENDDO
X(I)=Y(I)-S
ENDDO
DO I=1,NP
SV(I)=X(I)
ENDDO
NP=NP+1
SV(NP)=1
S=0.0D-000
DO I=1,NP
S=S+SV(I)**2
ENDDO
SS=0.0D-000
DO I=1,NP
SV(I)=SV(I)/DSQRT(ABS(S))
ENDDO
SSS=0.0D-000
DO I=1,NP
S=0.0D-000
SS=0.0D-000
DO J=1,NP
S=S+H(I,J)*SV(J)
SS=SS+LLA*L1(I,J)*SV(J)
ENDDO
E2(I)=S-SS
SSS=SSS+E2(I)
ENDDO
LLA=SSS
PRINT*
PRINT*, 'SUM(H*SV-E*L*SV) FROM SV =', LLA
END
```


SUBROUTINE TRI(NP,AD,B,C,S)

! ***** Подпрограмма триангуляризации *****

IMPLICIT REAL(8) (A-Z)

INTEGER I,J,K,NP

DIMENSION AD(0:50,0:50),B(0:50,0:50),C(0:50,0:50),

AAA(0:50,0:50)

DO I=1,NP

C(I,I)=1.0D-000

B(I,1)=AD(I,1)

C(1,I)=AD(1,I)/B(1,1)

ENDDO

DO I=2,NP

DO J=2,NP

S=0.0D-000

IF (J>I) GOTO 551

DO K=1,I-1

S=S+B(I,K)*C(K,J)

ENDDO

B(I,J)=AD(I,J)-S

GOTO 552

551 S=0.0D-000

DO K=1,I-1

S=S+B(I,K)*C(K,J)

ENDDO

C(I,J)=(AD(I,J)-S)/B(I,I)

552 CONTINUE

ENDDO

ENDDO

SS=0.0D-000

DO I=1,NP

DO J=1,NP

S=0.0D-000

DO K=1,NP

S=S+B(I,K)*C(K,J)

ENDDO

AAA(I,J)=S-AD(I,J)

SS=SS+AAA(I,J)

ENDDO

```
ENDDO
GOTO 578
PRINT*, "NEV = AD - B*C =0"
DO I=1,NP
DO J=1,NP
PRINT*,AAA(I,J)
ENDDO
ENDDO
578 S=1.0D-000
DO K=1,NP
S=S*B(K,K)
ENDDO
PRINT*, "NEV-TRI=",SS
9753 PRINT*
END
SUBROUTINE WW(SK,L,GK,R,N,H,WH)
! ***** Подпрограмма вычисления функции Уиттекера *****
IMPLICIT REAL(8) (A-Z)
INTEGER I,L,N,NN
DIMENSION V(50000)
H=H; N=N
SS=DSQRT(ABS(SK))
AA=GK/SS; BB=L; NN=500
HH=.02D-000; ZZ=1+AA+BB
AAA=1.0D-000/ZZ; NNN=2000
DO I2=1,NNN
AAA=AAA*I2/(ZZ+I2)
ENDDO
GAM=AAA*NNN**ZZ
RR=R; CC=RR*SS*2
DO I=0,NN
TT=HH*I
V(I)=TT**((AA+BB)*(1+TT/CC)**(BB-AA)*DEXP(-TT))
ENDDO
CALL SIMPS(NN,HH,V,S)
WH=S*DEXP(-CC/2.0D-000)/(CC**AA*GAM)
END
```

Приведем контрольный счет по этой программе, для найденных предварительно вариационных параметров, с параметрами потенциалов, значения которых приведены в табл.П2.1 и самой программе.

$$E = -19.163240724229320 \text{ (Энергия связи)}$$

(Вариационные параметры ALFA - α и BET - β)

N	ALFA	BET
1	3.273095667111755E-001	8.983828859473847E-002
2	3.172872902170442	1.207723068311927E-001
3	1.844963898289113E-001	5.507018219497912E-002
4	9.153345511558431E-002	1.025123206313353E-001
5	2.213721392830491E-001	3.620573882275837E-001
6	2.269904002428514E-001	4.017242168731691E-001
7	1.985961231123472E-001	1.634388187790707E-001
8	5.073985961415315E-001	4.769549654021469E-001
9	5.124708157837092E-001	4.828596792375761E-001
10	3.843254062764651E-001	2.094550079909185E-001

$$NEV-TRI = -2.131628207280301E-014$$

$$SUM(H*SV-E*L*SV) FROM SV = -3.552713678800501E-014$$

N SV

(Собственные вектора)

1	2.564677848067949E-002
2	-2.825587985872606E-003
3	3.379570860934880E-003
4	1.204452338550613E-002
5	-6.029327933110736E-001
6	4.606318693160417E-001
7	1.677085370227155E-001
8	-3.310475484431805
9	3.189208283959322

10 1.415768198190696E-001

NORM = 9.99999999999867E-001

NEV-DET = -1.136868377216160E-013

N = 9.9999999999991E-001

RM = 2.493621910682143

COULOMB ENERGY = 3.08664111481399512 (Кулоновская энергия)

CENTRIFUGAL ENERGY = 2.554040566190509 (Центробежная энергия)

KINETIC ENERGY = 13.889679234226240 (Кинетическая энергия)

POTENTIAL ENERGY = -38.693601715576360 (Потенциальная энергия)

TOTAL ENERGY = -19.163240800345610 (Полная энергия системы)

Параметры NEV-TRI, NEV-DET – величины невязок, полученные разными методами, N и NORM – нормировки ВФ, вычисленные различными способами.