

Skleidimo harmoninio oscilatoriaus bazėje su skirtingais variaciniais parametrais kiekvienai vidinei Jakobi koordinatei konvergavimo greičio tyrimas skaičiuojant kuloninės trijų netapatingų dalelių sistemos nereliatyvistinę pagrindinės būsenos energiją

Investigation of the rate of convergence of the harmonic oscillator expansion method with different sizes in the Jacobi coordinates for calculation of non-relativistic ground state energy of Coulomb non-identical three-particle systems

Algirdas Deveikis

Vytauto Didžiojo universitetas, Informatikos fakultetas, Vileikos 8, LT-44404 Kaunas

algirdas.deveikis@vdu.lt

Harmoninio oscilatoriaus (HO) bazė pasižymi daugeliu labai svarbių ir unikalių savybių labai supaprastinančių daugiadalelių kvantinių sistemų skaičiavimus [1]. Deja, konvergavimo greitis trimatėje HO bazėje realistiniams sąveikos potencialams yra ganėtinai žemas. Darbe [2] pasiūlytas naujas tridalelės HO bazės sudarymo ir taikymo variaciniuose skaičiavimuose metodas, kuriame pasiūlyta įvesti kiekvienai vidinei Jakobi koordinatei atskirą variacinį parametru. Pritaikytas kuloninių trijų netapatingų dalelių sistemų nereliatyvistinės pagrindinės būsenos energijos skaičiavimams, metodas pademonstravo žymų naujos HO bazės pranašumą lyginant su tradicine HO baze taikančia tik vieną netiesinį variacinį parametru.

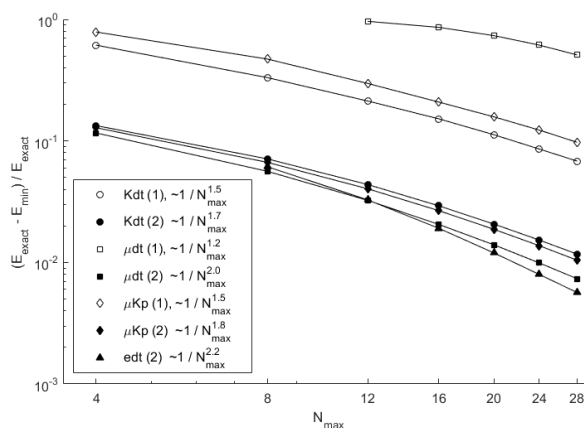
Šiame darbe atliktas metodo [2] konvergavimo greičio tyrimas skaičiuojant kuloninės trijų netapatingų dalelių sistemos nereliatyvistinę pagrindinės būsenos energiją. Atlikta trijų netapatingų dalelių sistemų pagrindinės būsenos energijų apskaičiuotų dviejų ir vieno netiesinio parametro atveju priklausomybės iki 28 HO sužadavimo kvantų skaičiaus ekstrapoliacija. Gauti rezultatai leidžia įvertinti ir palyginti HO sužadavimo kvantų skaičius reikiamus norimam skaičiavimo tikslumui pasiekti, kaip dviejų netiesinių parametru, taip ir tradiciniu metodu. 1 lentelėje pateikti rezultatai iliustruoja žymų naujo metodo (rezultatai pažymėti 2) pranašumą lyginant su tradiciniu metodu (rezultatai pažymėti 1).

1 lentelė. Kuloninių trijų netapatingų dalelių sistemų nereliatyvistinės pagrindinės būsenos energijos skaičiavimo tikslumo vertės, esant skirtingiems harmoninio oscilatoriaus sužadavimo kvantų skaičiams.

Tiksl.	<i>Kdt</i> (1)	<i>Kdt</i> (2)	μdt (1)	μdt (2)
10^{-2}	53	29	130	24
10^{-3}	83	55	189	47
10^{-4}	114	81	249	70
10^{-5}	145	107	308	93
10^{-6}	176	134	367	116
10^{-7}	207	160	426	139
10^{-8}	237	186	486	162

Variacinių skaičiavimų rezultatų bazėse su vienu ir dviem parametrais konvergavimo greičių palyginimas nagrinėtų trijų dalelių sistemų atvejams pateiktas 1 pav.

Iš gautų rezultatų matome, kad kuo didesnė dalelių masių asimetrija, tuo didesnis dviejų parametru įvedimo efektas: išauga rezultatų tikslumas ir padidėja variacinių skaičiavimų konvergavimo greitis, kaip tai matome *Kdt* ir μdt atvejais.



1 pav. Kuloninių trijų netapatingų dalelių sistemų nereliatyvistinės pagrindinės būsenos energijos variacinio skaičiavimo konvergavimo greičiai

Mažėjant masių skirtumui tarp lengvesniosios ir sunkesniųjų dalelių, energijos skaičiavimo rezultatų tikslumas ir konvergavimo greitis abiem metodais artėja, kaip iliustruota μdt ir μKp atvejais. Labai asimetrinėms masių atžvilgiu sistemoms, kaip *edt*, variaciniai skaičiavimai su vienu netiesiniu parametru nagrinėtoms sužadavimo energijoms net neduoda neigiamų energijų. Priešingai, variaciniai skaičiavimai su dviem netiesiniais parametrais tokioms sistemoms pasižymi didžiausiu skaičiavimų tikslumu ir aukščiausiu konvergavimo greičiu.

Reikšminiai žodžiai: harmoninio oscilatoriaus bazė, variacinis metodas, kuloninės trijų dalelių sistemos.

Literatūra

- [1] G.P. Kamuntavičius, J. Math. Phys. **55**, 042103 (2014).
- [2] A. Deveikis, Lith. J. Phys. **57**, (2017, priimta spaudai).