

УДК 519.6

doi 10.26089/NumMet.v19r320

## ЧИСЛЕННЫЕ АЛГОРИТМЫ БЕЗ НАСЫЩЕНИЯ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА АТОМА ВОДОРОДА

С. Д. Алгазин<sup>1</sup>

Математически проблема сводится к задаче на собственные значения для оператора Лапласа во всем пространстве с кулоновским потенциалом. Для численного решения этой задачи применяется новый математический аппарат, разработанный автором. Инверсией относительно единичной сферы задача сводится к проблеме собственных значений в проколоте в центре единичном шаре. Граничное условие в бесконечности (нулевое) переходит в центр шара. В шаре можно исключить периодическую переменную  $\varphi$  и построить дискретизацию, наследующую свойство разделения переменных дифференциального оператора ( $h$ -матрица). По  $\varphi$  выбиралось 11 точек. Клетки  $\Lambda_0, \Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3, \Lambda_4$  и  $\Lambda_5$  в  $h$ -матрице соответствуют линиям Lyman, Balmer, Paschen, Brackett, Pfund и Humphreys. Из рассмотрения, представленных расчетов видим, что  $\alpha$ -линия Lyman определена с точностью 5.43%. Таким образом, совпадение результатов расчетов с теоретическими значениями удовлетворительное.

**Ключевые слова:** численные алгоритмы без насыщения, уравнение Шрёдингера, атом водорода.

**1. Введение.** Уравнение Шрёдингера для атома водорода в атомных единицах имеет вид [1]

$$\Delta u + 2\left(E + \frac{Z}{r}\right)u = 0,$$

где волновая функция  $u$  обращается в нуль на бесконечности, энергетические уровни  $E$  водорода ( $Z = 1$ ) дискретны и отрицательны, что соответствует тому, что электрон получает положительную энергию только благодаря притяжению ядром. Численная методика аналогична методике, применяемой к уравнению Стокса для шара единичного радиуса [2]. Ниже приводятся результаты численных экспериментов в сравнении с [3, стр. 4].

**2. Вычислительные эксперименты.** Расчеты проводились для  $h$ -матрицы с  $n = 5$ . Клетки  $\Lambda_0, \Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3, \Lambda_4$  и  $\Lambda_5$  в  $h$ -матрице соответствуют линиям Lyman, Balmer, Paschen, Brackett, Pfund и Humphreys (см. рисунок). Число узлов по  $r$ :  $M = 65(51)$ , по  $\theta$ :  $N = 65(50)$ .

### Lyman

$L_\alpha = 1215$  в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения

$$-1281.6140204 \quad -1280.5666248 \quad (-1206.8595293 \quad -1206.5284603),$$

$L_\beta = 1026$  в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения

$$-1085.8787263 \quad -1071.3803035 \quad (-1080.0937459 \quad -1078.2656807),$$

$L_\gamma = 972$  в расчетах (на двух сетках) получено одно (два) значения

$$-971.49040936 \quad (-987.47989895 \quad -987.20859072),$$

$L_\delta = 949$  в расчетах (на двух сетках) получено одно значение

$$-931.48799737 \quad (-929.88356038),$$

$L_\epsilon = 937$  в расчетах (на двух сетках) получено одно значение

$$-927.28920019 \quad (-927.83614121).$$

<sup>1</sup> Институт проблем механики РАН им. А.Ю. Ишлинского, пр. Вернадского, 101-1, 119526, Москва; ведущий науч. сотр., e-mail: algazinsd@mail.ru

**Balmer**

$H_\alpha = 6563$  в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения

$$-6414.7644219 \quad -6411.8184549 \quad (-6719.5031264 \quad -6713.7681076),$$

$H_\beta = 4861$  в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения

$$-4728.0794345 \quad -4725.8926176 \quad (-5069.9584837 \quad -5065.6200392),$$

$H_\gamma = 4340$  в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения

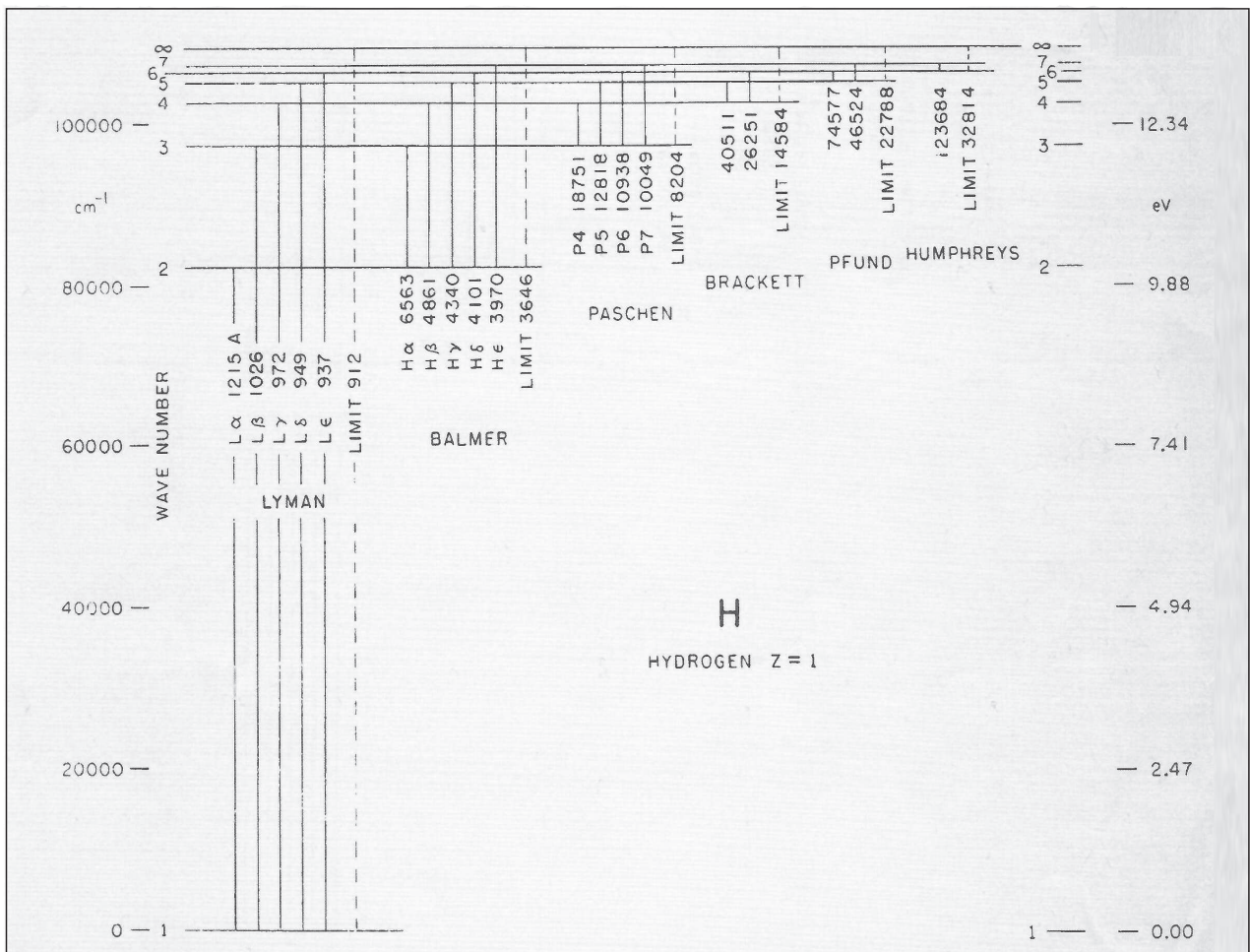
$$-4399.0927951 \quad -4304.8435413 \quad (-4510.6526910 \quad -4509.6992928),$$

$H_\delta = 4101$  в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения

$$-4230.0427587 \quad -4228.0805989 \quad (-4345.1451383 \quad -4341.4227806),$$

$H_\epsilon = 3970$  в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения

$$-3764.4798704 \quad -3762.7318994 \quad (-3687.1467754 \quad -3683.9849224).$$



**Paschen**

$P_4 = 18751$  в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения

$$-18661.012337 \quad -18653.473684 \quad (-19362.858015 \quad -19354.578425),$$

$P_5 = 12818$  в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения  
 $-12915.143899 \quad -12909.789401 \quad (-11773.543527 \quad -11768.492130),$

$P_6 = 10938$  в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения  
 $-10875.793105 \quad -10871.264914 \quad (-10189.799596 \quad -10185.424934),$

$P_7 = 10049$  в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения  
 $-10554.867226 \quad -10554.496995 \quad (-9619.0571470 \quad -9618.4865364).$

**Brackett**

40511 в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения  
 $-40809.107064 \quad -40803.761270 \quad (-39468.516103 \quad -39459.754185),$

26251 в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения  
 $-26552.240528 \quad -26544.683077 \quad (-24746.474828 \quad -24751.981353).$

**Pfund**

74577 в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения  
 $-75998.467516 \quad -75992.564668 \quad (-78425.064365 \quad -78414.737814),$

46524 в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения  
 $-47193.303397 \quad -47184.383556 \quad (-46088.018214 \quad -46081.937515).$

**Humphreys**

123684 в расчетах (на двух сетках) получены два близких значения  
 $-128537.54569 \quad -128508.07839 \quad (-128485.30579 \quad -128474.21142).$

**3. Выводы** Из рассмотрения представленных расчетов видим, что  $\alpha$ -линия Луман определена с точностью 5.43%. Таким образом, совпадение результатов расчетов с теоретическими значениями удовлетворительное.

Работа выполнена по теме государственного задания № АААА-А17-117021310380-1.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bette H., Salpeter E.* Quantum mechanics of one- and two-electron atoms. Berlin: Springer, 1957.
2. *Алгазин С.Д.*  $h$ -матрица, новый математический аппарат для дискретизации многомерных уравнений математической физики. М.: Издательство URSS, 2017.
3. *Wilson M., Observatories P.* Partial Grotrian diagrams of astrophysical interest. Washington, D.C.: National Bureau of Standards, 1968.

Поступила в редакцию  
 09.04.2018

---

**Numerical Algorithms without Saturation for the Schrödinger Equation  
of Hydrogen Atom**

S. D. Algazin<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics, Russian Academy of Sciences; prospekt Vernadskogo 101, Moscow, 119526, Russia; Dr. Sci., Leading Scientist, e-mail: algazinsd@mail.ru*

Received April 9, 2018

**Abstract:** Mathematically, the problem under consideration is reduced to the eigenvalue problem for the Laplace operator in the entire space with the Coulomb potential. The new mathematical apparatus developed by the author is applied to the numerical solution of the reduced problem. This problem is reduced to the eigenvalue problem in the unit ball punctured at the center after inversion with respect to the unit sphere. The null boundary condition at infinity is transformed to the condition at the center of the unit sphere. In the sphere it is possible to split off the periodic variable  $\varphi$  and to construct the discretization inheriting the property of the separation of variables of the differential operator (the  $h$ -matrix). Eleven points is chosen based on the values of  $\varphi$ . The blocks  $\Lambda_0, \Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3, \Lambda_4$ , and  $\Lambda_5$  of the  $h$ -matrix correspond to the Lyman, Balmer, Paschen, Brackett, Pfund, and Humphreys lines. From the obtained numerical results, it follows that the Lyman-alpha line is determined with the accuracy equal to 5.43%. Thus, the coincidence of the numerical results with the theoretical values is satisfactory.

**Keywords:** numerical algorithms without saturation, Schrödinger equation, hydrogen atom.

### References

1. H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms* (Springer, Berlin, 1957).
2. S. D. Algazin,  *$h$ -matrix: A New Mathematical Apparatus for the Discretization of Multidimensional Equations in Mathematical Physics* (Editorial URSS, Moscow, 2017) [in Russian].
3. C. E. Moore and P. W. Merrill, *Partial Grotrian Diagrams of Astrophysical Interest* (National Bureau of Standards, Washington, D.C., 1968).