

РАДИАЛЬНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ АТОМА ГЕЛИЯ

*В. В. Насыров**

*Тихоокеанский государственный университет
680035, Хабаровск, Россия*

Поступила в редакцию 4 марта 2017 г.

Построена модельная волновая функция основного состояния атома гелия и проведено сравнение свойств данной функции с аналогичной функцией других авторов. Выполнен расчет средних величин, влияющих на матричные элементы, возникающие при описании атомных процессов.

DOI: 10.7868/S0044451017090012

Экспериментальные исследования двойной ионизации нейтральных атомов электронным ударом, проведенные в 1999 г. группой авторов [1] в рамках изучения процессов ($e, 3e$), привели к накоплению массива численных данных и дали достаточно большой материал для теоретического анализа этих процессов (например, [2–8]). В серии экспериментов [1] были измерены абсолютные пятикратные дифференциальные сечения (FDCS) процесса ($e, 3e$) на атоме гелия для случая, когда падающий и рассеянный электроны имеют достаточно большую энергию (около 5 кэВ), а оба выбитых электрона имеют энергии не более 10 эВ. Практически сразу обнаружилось, что имеющиеся к тому моменту теоретические методы [2–4] могли воспроизвести формы кривых FDCS весьма приближенно и требовали введения корректирующих множителей, поэтому эксперимент [1] стал эталоном оценки качества предлагаемых теоретических моделей и методов решения кулоновской задачи трех тел, а также построенных в их рамках волновых функций двухэлектронных атомных систем.

В настоящей работе рассмотрен численный метод построения модельной волновой функции атома гелия. Данная задача все еще является актуальной, несмотря на многочисленные теоретические исследования, посвященные решению кулоновской задачи трех тел, в силу невозможности получения точного аналитического выражения для таких волновых функций. Поэтому в последнее время стало уделять-

ся особое внимание построению модельных волновых функций с относительно простыми аналитическими выражениями, которые позволили бы провести ясную интерпретацию атомных процессов.

Так, в 2008 г. вышла работа [5], в которой был проведен подробный анализ модельных волновых функций атома гелия и предложена модельная функция, построенная на СЗ-базисе из работы [3], которая в атомных единицах ($m_e = e = \hbar = 1$) имеет вид

$$\varphi^{C3} = 1.55314 \exp(-2(r_1 + r_2)) \times (1 + r_{12}/2 + 0.03889r_{12}^2), \quad (1)$$

где r_1, r_2 — модули радиус-векторов атомных электронов. Несомненным преимуществом предлагаемой функции является лаконичный вид выражения (1) и явный учет корреляции атомных электронов при помощи параметра $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$.

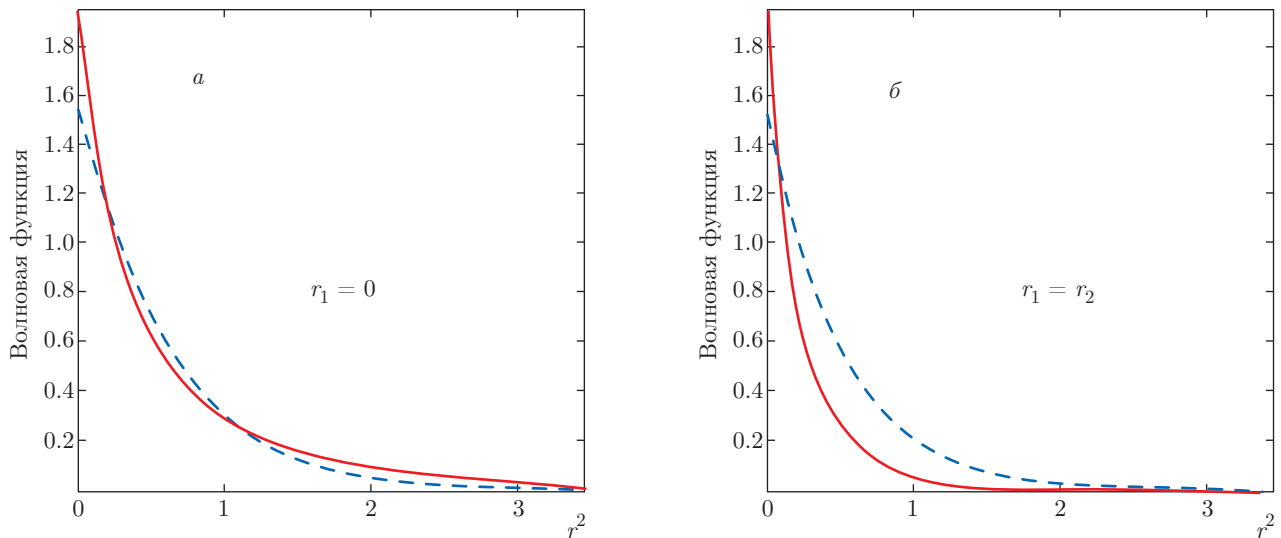
В работе [6] была показана методика решения уравнения Шредингера, описывающего состояние двухэлектронной атомной системы с зарядом ядра Z :

$$\left[-\frac{1}{2} \Delta_1 - \frac{1}{2} \Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right] \varphi = E\varphi. \quad (2)$$

Очевидно, что волновая функция $\varphi = \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, описывающая начальное связанное состояние должна принадлежать дискретному спектру ($E \leq 0$) и удовлетворять условиям

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= O(r_i^l) \quad \text{при } r \rightarrow 0, \quad i = 1, 2, \\ \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &\rightarrow 0 \quad \text{при } r \rightarrow \infty, \quad i = 1, 2. \end{aligned}$$

* E-mail: 000612@pnu.edu.ru



Функции основного состояния атома гелия: сплошная линия наш расчет (8), штриховая линия — расчет по формуле (1)

Модельная волновая функция основного состояния атома гелия ($Z = 2$)

$$|\varphi_0\rangle = \sum_{l\lambda} \sum_{n=1}^{N_l} \sum_{\nu=1}^{N_\lambda} \alpha_{n\nu l\lambda}^0 |(nl)(\nu\lambda) : 00\rangle, \quad (3)$$

представляется в виде разложения по базисному набору хартри-фоковского типа. Величина N_l подбирается независимо для каждой парциальной волны для обеспечения оптимальной сходимости расчетов.

Отметим, что в выражении (3) нет явного учета корреляции атомных электронов:

$$\begin{aligned} |(nl)(\nu\lambda) : LM\rangle &= \frac{1}{r_1 r_2} \times \\ &\times P \left[\chi_{nl}^{(2)}(r_2) \chi_{\nu\lambda}^{(2)}(r_1) \mathcal{Y}_{l\lambda LM}(\hat{r}_2, \hat{r}_1) \right], \quad n \leq N_l, \\ |(nl)(\nu\lambda) : LM\rangle &= \frac{1}{r_1 r_2} \times \\ &\times P \left[\chi_{nl}^{(2)}(r_2) \Phi_{\nu\lambda}^{(2)}(r_1) \mathcal{Y}_{l\lambda LM}(\hat{r}_2, \hat{r}_1) \right], \quad n > N_l, \end{aligned} \quad (4)$$

где

$$\mathcal{Y}_{l\lambda LM}(\hat{r}_2, \hat{r}_1) = \sum_{m\mu} \langle lm\lambda\mu | LM \rangle Y_{lm}(\hat{r}_2) Y_{\lambda\mu}(\hat{r}_1).$$

Функция $\chi_{nl}^{(Z)}$ определяет псевдосостояние электрона в водородоподобном ионе с зарядом ядра Z и является решением двухчастичного уравнения Шредингера:

$$\left[\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \varepsilon_{nl} + \frac{Z}{r} \right] \chi_{nl}^{(Z)} = 0, \quad (5)$$

где ε_{nl} — энергия псевдосостояния с квантовыми числами nl . Волновые функции псевдосостояний в предлагаемом методе ищутся в виде разложения по квадратично-интегрируемым базисным функциям

$$\chi_{nl}^{(Z)}(r) = \sum_{m=1}^{N_l} d_{mn}^l \Phi_{ml}(\xi_l r), \quad (6)$$

где функции $\Phi_{ml}(\xi_l r)$ образуют лагеровский базис

$$\begin{aligned} \Phi_{ml}(\xi_l r) &= \sqrt{\frac{m!}{(m+2l+1)!}} (\xi_l r)^{l+1} \times \\ &\times \exp\left(\frac{\xi_l}{2} r\right) L_m^{2l+1}(\xi_l r), \end{aligned} \quad (7)$$

ξ_l — параметр базиса, $L_m^{2l+1}(\xi_l r)$ — присоединенные полиномы Лагерра.

В случае атома гелия использование предлагаемого подхода позволяет получить энергию связи атома гелия равной 2.90362 ат. ед., что находится в очень хорошем согласии с экспериментальным значением 2.90370 ат. ед. Однако для получения такого результата требуется учитывать более двадцати членов разложения в выражении (6), что делает затруднительным аналитический анализ выражений, использующих такую функцию.

В данной работе для упрощения вида модельной волновой функции в выражении (3) мы ограничились s -состояниями атома гелия. Для случая $N_{l=0} = 3$, $\xi_{l=0} = 4$ волновая функция атома гелия, построенная по методу псевдосостояний, имеет следующий вид (в ат. ед.):

Таблица. Энергии и средние величины для модельных волновых функций

Модельная функция	$-\langle E \rangle$	$\langle r_i \rangle$	$\langle r_i^2 \rangle$	$\langle 1/r_i \rangle$	$\langle r_{12} \rangle$	$\langle r_{12}^2 \rangle$	$\langle 1/r_{12} \rangle$	$\langle r_1 r_2 \rangle$
φ^{C3}	2.8785	0.8613	0.9951	1.7665	1.3385	2.2057	0.9934	-0.1168
φ_0^s	2.8781	0.9241	1.1694	1.6890	1.3725	2.3386	0.9935	+0.3651
Точные значения из [9]	2.9037	0.9295	1.1935	1.6883	1.4221	2.5164	0.9458	-0.0647

$$\varphi_0^s = P \left[1.94677e^{-2(r_1+r_2)}(0.5 - 0.60684r_1 + 0.65906r_1^2 + 0.94300r_1r_2 - 1.00201r_1r_2^2 + 0.22041r_1^2r_2^2) \right]. \quad (8)$$

На рисунке приведено сравнение графиков волновых функций (1) и (8) для двух случаев. В первом случае при $r_1 = 0$ (рис. а) волновые функции практически не отличаются друг от друга; во втором — при $r_1 = r_2$ (рис. б) различия в волновых функциях очевидны, хотя «отключение» радиальной корреляции в (1) формально должны делать используемые численные модели близкими.

В таблице проведено сравнение результатов расчетов по формулам (1) и (8) и точных значений средних значений величин, входящих в (1), из чего можно сделать выводы о качестве каждой из волновых функций в различных областях конфигурационного пространства. Из сравнения результатов расчетов можно сделать вывод о том, что, несмотря на отсутствие явного учета корреляции атомных электронов в формуле (8), результаты этой модели в целом несколько лучше модели (1), в которой выполнен явный учет радиальной корреляции. Исключение составляет лишь последний столбец таблицы.

В заключение отметим, что несмотря на то, что в данной работе не затрагивается вопрос построения волновых функций непрерывного спектра атома гелия, в работах [7, 8] показано, что учет корреляции применительно к процессам рассеяния крайне

важен и должен вестись как в начальном, так и в конечном состояниях квантовой системы.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Lahmam-Bennani et al., Phys. Rev. A **59**, 3548 (1999).
2. J. S. Briggs and V. Schmidt, J. Phys. B **33**, R1 (2000).
3. B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, 2nd ed. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ (2003).
4. A. S. Kheifets and I. Bray, Phys. Rev. A **69**, 50701(R) (2004).
5. L. U. Ancarani et al., Phys. Rev. A **77**, 062712 (2008).
6. V. A. Knyr, V. V. Nasyrov, and Yu. V. Popov, *Correlation and Polarization in Photonic, Electronic, and Atomic Collisions*, ed. by G. F. Hanne et al., AIP Conf. Proc. No. 697 AIP, Melville, New York (2003).
7. S. A. Zaytsev, V. A. Knyr, and Yu. V. Popov, Phys. At. Nucl. **70**, 676 (2007).
8. M. S. Aleshin and S. A. Zaytsev, Bulletin of PNU **3**(22), 13 (2011).
9. G. W. F. Drake, *Springer Handbook of Atomic, Molecular, and Optical Physics*, Springer, New York (2005).