УДК 539.184.2

М. Гайсак[1], Ю. Мучичка[2], В. Онисько[2]
[1]Інститут електронної фізики НАН України,
88017, Ужгород, вул. Університетська, 21, Україна
[2]Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54, Україна
e-mail: m.haysak@gmail.com

ЕНЕРГІЯ ЗВ'ЯЗКУ НИЖЧИХ ^{1,3}S- СТАНІВ ДВОВИМІРНОГО АТОМА ГЕЛІЮ У ГІПЕРСФЕРИЧНОМУ АДІАБАТИЧНОМУ ПІДХОДІ

У рамках адіабатичного гіперсферичного підходу у наближенні Борна-Оппенгеймера проведені розрахунки енергій зв'язку двовимірного атома гелію для нижчих двох серій у синглетному та триплетному станах. Для усунення розбіжностей у матричних елементах оператора потенціальної енергії застосовано масштабовану функцію, яка залежить від кутових змінних. Розрахунки виконані при різних розмінностях базису. Отримані результати порівнюються з розрахунками в інших підходах. Результати знаходяться у якісному узгодженні. Проведені розрахунки як при нескінченій масі ядра, так і при врахуванні скінченої маси ядра. Врахування скінченої маси ядра складає похибку порядку 10^{-3} а.о.

Ключові слова: метод гіперсферичних координат, атом гелію, матричні елементи.

Вступ

Однією з простіших квантових три-частинкових систем є атом гелію. Для реалістичної взаємодії така задача не розв'язується в аналітичному вигляді навіть в одновимірному просторі. Відомо, що енергія зв'язку для атома гелію у двовимірному просторі майже у чотири рази перевищує енергію основного синглетного стану [1, 2]. Виникає природне запитання, чи справедливе таке твердження для збуджених станів.

У даній роботі проводяться чисельні розрахунки для енергій зв'язку нижчих синглетних та триплетних станів двовимірного атома гелію. Розрахунки виконані у рамках гіперсферичного адіабатичного підходу, який ґрунтується на колективних змінних [3]. Для усунення розбіжностей із матричних елементів оператора потенціальної енергії взаємодії розв'язувалось масштабоване нерелятивістське рівняння Шредінгера [4].

Нерелятивістське рівняння Шредінгера для квантової системи трьох заряджених частинок

Нерелятивістське рівняння Шредінгера у двовимірному просторі для задачі трьох тіл має вигляд:

$$\left[-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}\frac{1}{m_i}\Delta_i + V(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}_3) - \tilde{E}\right]\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}_3) = 0, \quad (1)$$

де $m_i, \vec{r}_i$ – маса та радіус-вектор i-ої частинки, відповідно, Δ_i – оператор Лапласа, який діє на координати i-ої частинки, V та Ψ – оператор потенціальної взаємодії і хвильова функція системи трьох часток, $\tilde{E}$ – повна енергія системи. Виберемо оператор потенціальної енергії, який включає лише парну кулонівську взаємодію між частинками, та має вигляд:

$$V(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}_3) = \sum_{i<j=1}^{3}\frac{z_i z_j}{\left|\vec{r}_i - \vec{r}_j\right|}. \quad (2)$$

Потенціальна енергія (2) дозволяє у рівнянні (1) відокремити рух системи центра мас. Для цього слід ввести відносні координати Якобі $(\vec{\rho}, \vec{\tau})$ та радіус-вектор системи центра мас $\vec{\Re}$ [5], які задаються наступним чином:

$$\vec{\rho} = d_1(\vec{r}_3 - \vec{r}_2),\ \vec{\tau} = d_2\left(\vec{r}_1 - \frac{m_2\vec{r}_2 + m_3\vec{r}_3}{m_2 + m_3}\right), \qquad (3)$$
$$\vec{\Re} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2 + m_3\vec{r}_3}{m_1 + m_2 + m_3},$$

де d_1 та d_2 – константи, які вибираються таким чином, щоб перетворення (3) були ортогональними.

Рівняння Шредінгера (1) у змінних (3) буде мати наступний вигляд:

$$\left[\left(-\frac{1}{2\mu_1}\Delta_\rho - \frac{1}{2\mu_2}\Delta_\tau - \frac{1}{2M}\Delta_{\Re}\right) + V(\vec{\rho}, \vec{\tau}) - \right]\Psi\left(\vec{\rho}, \vec{\tau}, \vec{\Re}\right) = \tilde{E}\ \Psi\left(\vec{\rho}, \vec{\tau}, \vec{\Re}\right), \qquad (4)$$

де M – повна маса системи, а μ_i – відносні маси, які виражаються співвідношеннями:

$$\mu_1 = \frac{m_2 m_3}{d_1^{\,2}(m_2 + m_3)},\ \mu_2 = \frac{m_1(m_2 + m_3)}{d_2^{\,2} M}. \qquad (5)$$

Рівняння (4) допускає відокремлення змінних, тобто його розв'язки можна шукати у вигляді $\Psi(\vec{\rho}, \vec{\tau}, \vec{\Re}) = \psi(\vec{\rho}, \vec{\tau})\phi(\vec{\Re})$. Відокремивши змінні, рівняння (4) еквівалентне системі рівнянь:

$$\begin{cases} \left[-\left(\frac{1}{2\mu_1}\Delta_\rho + \frac{1}{2\mu_2}\Delta_\tau\right) + V(\vec{\rho}, \vec{\tau})\right]\psi(\vec{\rho}, \vec{\tau}) = \varepsilon\psi(\vec{\rho}, \vec{\tau}), \\ -\frac{1}{2M}\Delta_{\Re}\varphi(\vec{\Re}) = (\tilde{E} - \varepsilon)\varphi(\vec{\Re}), \end{cases} \qquad (6)$$

де ε – енергія відносного руху системи. Перше рівняння системи (6) описує відносний рух системи, а друге – рух системи центру мас. Друге рівняння системи (6) є рівнянням Гельмгольца, розв'язки якого добре відомі [6]. Таким чином, задача звелась до знаходження розв'язку лише рівняння відносного руху системи.

Оператор потенціальної енергії (2) у відносних змінних (3) має вигляд:

$$\frac{z_2 z_3 d_1}{|\vec{\rho}|} + \frac{z_1 z_2 d_2}{\left|\vec{\tau} + \frac{d_2^2 m_3}{m_{23}}\vec{\rho}\right|} + \frac{z_1 z_3 d_2}{\left|\vec{\tau} - \frac{d_2^2 m_2}{m_{23}}\vec{\rho}\right|}. \qquad (7)$$

Гіперсферичні координати

Розв'язок рівняння відносного руху зручно шукати у еліптичній системі координат [7]. Для цього від змінних Якобі перейдемо до змінних (R, α, γ_1, γ_2), які задаються співвідношеннями:

$$R = \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu}\vec{\rho}^{\,2} + \frac{\mu_2}{\mu}\vec{\tau}^{\,2}},\ tg\,\alpha = \frac{\sqrt{\mu_1}\rho}{\sqrt{\mu_2}\tau},\ \begin{pmatrix} 0 \le R < \infty, \\ 0 \le \alpha \le \pi/2 \end{pmatrix}, \qquad (8)$$

де μ - довільна константа, γ_1 і γ_2 – полярні кути радіус-векторів $(\vec{\rho}, \vec{\tau})$. Рівняння відносного руху у змінних (8) набуде вигляду:

$$\left[-\frac{1}{2\mu}\left(\frac{1}{R^3}\frac{\partial}{\partial R}\left(R^3\frac{\partial}{\partial R}\right) + \frac{1}{R^2}\hat{K}^2\right) + V(R, \alpha, \gamma_1, \gamma_2) - \varepsilon\right]\varphi(R, \alpha, \gamma_1, \gamma_2) = 0, \qquad (9)$$

де $\hat{K}^2$ - квадрат оператора узагальненого кутового моменту системи трьох часток, який має вигляд:

$$\frac{1}{\sin\alpha\cos\alpha}\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\sin\alpha\cos\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}\right) + \frac{1}{\sin^2\alpha}\frac{\partial^2}{\partial\gamma_1^2} + \frac{1}{\cos^2\alpha}\frac{\partial^2}{\partial\gamma_2^2}. \qquad (10)$$

Оператор потенціальної енергії у змінних (8) для атома гелію (z_1 = 2, z_2 = z_3 = –1, m_2 = m_3 =1) має вигляд:

$$\frac{\sqrt{2\mu}a}{R}\left(\frac{1}{\sqrt{(a\sin\alpha)^2 - a\sin 2\alpha\cos\theta + \cos^2\alpha}} + (a\to -a) - \frac{1}{2a|\sin\alpha|}\right) \quad (11)$$

де $\theta = \gamma_1 - \gamma_2$, $a = \sqrt{\dfrac{m_1}{m_1+2}}$.

Крайова задача на власні значення та власні функції оператора $\hat{\Lambda}^2$ має аналітичний розв'язок [1], причому

$$\lambda_n{}^2 = (2n+m_1+m_2)(2n+m_1+m_2+2),$$
$$f_{nm_1m_2}(\alpha) = N_{nm_1m_2}(\sin\alpha)^{m_1+\frac{1}{2}}(\cos\alpha)^{m_2+\frac{1}{2}}\cdot P_n^{(m_1,m_2)}(\cos 2\alpha)e^{im_1\gamma_1+im_2\gamma_2}, \quad (12)$$

де N_{nmr} – константа нормування, $P_n^{(a,b)}(x)$ – поліноми Якобі n-ої степені від незалежної змінної x.

Оскільки потенціальна енергія має особливі точки, то слідуючи за Г. Накатсуї [4], будемо розглядати масштабоване рівняння Шредінгера. Як масштабовану функцію виберемо функцію $g(\alpha, \theta)$, яка задовольняє у точках сингулярності умовам:

$$\lim_{\alpha\to\alpha_i,\theta\to\theta_i} g(\alpha,\theta)V(R,\alpha,\theta) \neq 0, \quad (13)$$

де (α_ι, θ_ι) – особливі точки оператора потенціальної енергії. Явний вигляд масштабованого множника запишемо у вигляді:

$$g(\alpha,\theta) = \left|\frac{\sin\alpha\sqrt{\cos^2\alpha + a\sin 2\alpha\cos\theta + a^2\sin^2\alpha}}{\sqrt{\cos^2\alpha - a\sin 2\alpha\cos\theta + a^2\sin^2\alpha}}\right|. \quad (14)$$

У якості базисних функцій при знаходженні частинних розв'язків рівняння (9) будемо користуватись каналовими функціями, які є власними функціями оператора на поверхні тривимірної сфери, який одержується з (9) при фіксованому значенні радіальної змінної. Із врахуванням масштабованого множника крайова задача для каналових функцій має вигляд:

$$g(\alpha,\theta)\left[\hat{\Lambda}^2 - 2R\sqrt{\mu}V(\alpha,\theta)\right]\chi_\nu(R,\alpha,\theta) = -2\mu R^2 U_\nu(R)\chi_\nu(R,\alpha,\theta)g(\alpha,\theta), \quad (15)$$

де $\chi_\nu(R, \alpha, \theta)$ та $U_\nu(R)$ – каналові функції та адіабатичні потенціали, які параметрично залежать від радіальної змінної, ν – сукупність індексів, якими характеризують частинні розв'язки (15).

Для розв'язання крайової задачі (15) скористаємось власними функціями оператора $\hat{\Lambda}^2$ (12), тобто представимо каналову функцію у вигляді наступного ряду:

$$\chi_\nu(R,\alpha,\theta) = \sum_{n,m} C_{n,m}^\nu(R)\, f_{n,m}(\alpha,\theta), \quad (16)$$

де $C^\nu_{nm}(R)$ - невідомі коефіцієнти, які визначаються розв'язками однорідної алгебраїчної системи однорідних рівнянь. Таким чином, одержуємо узагальнену крайову задачу на власні значення та власні функції, яка має вигляд:

$$Ax = \lambda Bx, \quad (17)$$

де A та B квадратні матриці, розмірність яких співпадає з розмірністю базису, на якому діагоналізується оператор, що входить у рівняння (15). Розв'язавши задачу (15), отримуємо власні значення (адіабатичні потенціали) та власні функції (каналові функції).

Каналові функції використаємо для знаходження частинних розв'язків рівняння (9). Для цього розкладемо розв'язок (9) за власними функціями крайової задачі (15), а саме:

$$\varphi(R,\alpha,\theta)=\sum_{\nu} f_{\nu}(R)\chi_{\nu}(R,\alpha,\theta), \qquad (18)$$

де $f_{\nu}(R)$ – невідомі коефіцієнти розкладу, які задовольняють наступній системі диференціальних рівнянь:

$$\left[\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial R}\left(R\frac{\partial}{\partial R}\right)+U_{\nu}(R)+2\mu E\right]f_{\nu}(R)+ \sum_{\kappa}\left(2P_{\nu\kappa}(R)\frac{d}{dR}+Q_{\nu\kappa}(R)\right)f_{\kappa}(R)=0, \qquad (19)$$

де $P_{\nu\kappa}(R)$ і $Q_{\nu\kappa}(R)$ – так звані неадіабатичні потенціали, які описують зв'язок між каналами і задаються наступним чином:

$$P_{\nu\kappa}(R)=\left\langle \chi_{\nu}(R,\alpha)\middle|\frac{\partial}{\partial R}\chi_{\kappa}(R,\alpha)\right\rangle, \qquad (20)$$
$$Q_{\nu\kappa}(R)=\left\langle \chi_{\nu}(R,\alpha)\middle|\frac{\partial^2}{\partial R^2}\chi_{\kappa}(R,\alpha)\right\rangle,$$

де дужками $\langle\ |\ \rangle$ позначено інтегрування за кутовою змінною α.

Численні розрахунки та обговорення результатів

Систему рівнянь (19) будемо розв’язувати у наближенні Борна – Оппенгеймера. Суть такого наближення полягає у знехтуванні неадіабатичними потенціалами (20), тобто залежність каналової функції від радіальної змінної вважаємо повільною, внаслідок чого частинні похідні за радіальною змінною дорівнюють нулю.

Результати розрахунків енергій зв’язку для синглетного та триплетного станів атома гелію, а також результати, одержані в інших підходах, наведені в таблиці 1.

Таблиця 1

Залежність енергій (- *E* а.о.) зв’язку нижчих синглетних та триплетних станів від розмірності базису при визначенні адіабатичних потенціалів

Квантові стани ^{4}He	Розмірність базису					Значення (E) в інших підходах
	6	15	28	36	45	
^{1}S(1s^2)	8.932949	10.78608 (10.782145)	11.90248	12.31031	12.648402	11.899822 [2] 8.519915 [8]
^{1}S(1s2s)	5.087537	6.734147 (6.731715)	7.883782	8.329825	8.540281	8.295964 [2]
^{1}S(2s^2)	0.952673	1.224508 (1.224041)	1.378808	1.433268	1.596254	
^{1}S(2s3s)	0.694725	0.855092 (0.854567)	0.945024	1.044557	1.083752	
^{3}S(1s2s)	2.645409	2.707099 (2.706085)	2.727633			2.437559 [8]
^{3}S(1s3s)	1.48551	1.658738 (1.658148)	1.755666			
^{3}S(2s3s)	0.764847	0.874165 (0.873843)	0.91473			
^{3}S(2s4s)	0.496927	0.572999 (0.571789)	0.615959			

Примітка. Значення енергій, наведені в дужках, одержані при скінченій масі ядра ^{4}He.

Як видно з наведених результатів, зростання розмірності базису призводить до збільшення енергії зв’язку. Порівняння величини енергії зв’язку для основного синглетного стану з результатом роботи [8] показує, що похибка становить близько семи відсотків. Для триплетного стану відповідна похибка становить близько дванадцять відсотків. Із наведених у таблиці даних також слідує, що поправка для скінченої маси ядра як для основних, так і для збуджених S-станів складає величину порядку 10^{-3} а.о.

Висновки

Таким чином, проведені розрахунки показали, що застосування масштабованого рівняння Шредінгера у гіперсферичному адіабатичному підході дає можливість одержати енергії зв'язку для синглетних та триплетних S – станів двовимірного атома гелію, які узгоджуються з результатами, отриманими в інших підходах. Більш того, даний підхід дає змогу проводити оцінку внеску ізотонічних ефектів у значення енергій зв'язку. Представляє значний інтерес провести оцінку величини ефектів, зумовлених зв'язком каналів, тобто здійснити вихід за рамки наближення Борна-Оппенгеймера.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Burdík Č., Haysak M., Nagy M. // Cz. J. Phys. – 2004. – V.54. - N11. – P. 1197.
2. Hilico L., Grermaud B., Jonckheere T., Billy N, Delande D, // Phys. Rev. – 2002. – V.A66. – P. 022101.
3. Lin C.D. // Phys. Rep. – 1995. – V. 257. – P.1.
4. Nakatsuji H. // Phys. Rev. Lett. – 2004. – V.93. - N3. - P. 030403.
5. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. - Т.3. – Москва: Мир, 1982. – 443 с.
6. Варшалович Д.А., Москальов А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. – Ленинград: Наука, 1975. – 441 с.
7. Уиттекер Э.Т., Ватсон Дж.Н. Курс современного анализа. - Т.2. – Москва: Физ.-мат. лит., 1963. – 516 с.
8. Wen-Fang X. // Commun. Theor. Phys. – 2005. - V.44. – P. 45.

Стаття надійшла до редакції 28.05.2011

M. Haysak[1], Yu. Muchichka[2], V. Onysko[2]
[1]Institute of Electron Physics NASc of Ukraine, 88017, Uzhhorod, Universitetskaya Str., 21
[2]Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshin Str., 54

THE BOUNDING ENERGY VALUES FOR LOWER ^{1,3}S - STATES OF TWO-DIMENSIONAL HELIUM ATOM IN HYPERSPHERICAL ADIABATIC APPROACH

In the framework of hyperspherical approach in Born-Oppenheimer approximation calculations of bounding energy values were performed for lower two series in singlet and triplet states of two-dimensional helium atom. To exclude the divergences in matrix elements of potential energy operator the scaling function was used, which depends on angular variables. Calculations were performed for different dimensions of the basis. The received results are compared with results, which were obtained in other approaches. The results are in qualitative agreement. Calculations were made at unlimited nucleus mass and accounting limited nucleus mass. Accounting limited nucleus mass gives an error of about 10^{-3} a.u.

Key words: hyperspherical coordinates method, matrix elements, helium atom.

М. Гайсак[1], Ю. Мучичка[2], В.Онисько[2]
[1]Институт электронной физики НАН Украины, 88017, м. Ужгород, ул. Университетская, 21
[2]Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54

ЭНЕРГИЯ ЗВЯЗИ НИЗШИХ ^{1,3}S- СОСТОЯНИЙ ДВУМЕРНОГО АТОМА ГЕЛИЯ В ГИПЕРСФЕРИЧЕСКОМ АДИАБАТИЧЕСКОМ ПОДХОДЕ

В рамках адиабатического гиперсферического подхода в приближении Борна-Оппенгеймера выполнены расчеты энергий связи двумерного атома гелия для низших двух серий в синглетном и триплетном состояниях. Для устранения расхождения в матричных элементах оператора потенциальной энергии использована масштабированная функция, которая зависит от угловых переменных. Расчеты проведены при различных размерностях базиса. Полученные результаты сравниваются с данными, полученными в других подходах. Результаты находятся в качественном согласии. Расчеты выполнены, как при бесконечной массе ядра, так и с учетом конечной массы ядра. Учет конечной массы ядра составляет ошибку порядка 10^{-3} а.е.

Ключевые слова: метод гиперсферических координат, атом гелия, матричные элементы.