

# СТОХАСТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА АТОМНЫХ СИСТЕМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

И.В.Куклина

Одесский политехнический университет, п/я 116, Одесса-9, 65009

На основе численного решения уравнения Шредингера выполнен расчет полной энергии многоэлектронных нейтральных атомов с зарядом ядра  $Z=2-10$  при различных значениях величины магнитного поля. Зависимость энергии атомной системы от напряженности поля имеет сложный вид, в частности, численно обнаружены «пересечения» уровней как одна из характерных особенностей квантовых хаотических систем.

В последние годы значительное внимание привлекает проблема описания и расчета характеристик многоэлектронных атомов в сильных магнитных полях (см. [1–12]). С одной стороны, традиционный интерес связан с широким кругом приложений, в частности, астрофизических (сильная деформация электронной структуры атомов в сверхсильных магнитных полях на поверхности нейтронных звезд) и др. [1–3]. С другой стороны, сама теория эффекта Зеемана, по крайней мере, многие результаты оказываются либо малопригодными для конкретных применений, либо вообще незавершенными вплоть до последнего времени [4–6]. Это особенно актуально в области достаточно сильных полей. Крайне важным выявилось обнаружение в поведении атомных систем в статическом магнитном поле элементов квантового хаоса [3–5, 10–12]. Искомый результат получен, в частности, для атома Н. Еще более значительный интерес представляет изучение стохастической динамики неводородоподобных систем в сильном магнитном поле. В серии работ [10–12] был развит принципиально новый подход к описанию атомных систем в магнитном поле, базирующийся на операторной теории возмущений и новой эффективной, конечно-разностной схеме решения уравнения Шредингера для атома в поле. В данной работе, продолжающей исследования [10–12], решается задача расчета

энергий многоэлектронных атомов с зарядом ядра  $Z=2-10$  в широком интервале изменения значений магнитного поля ( $Y = w/w_0 = 0.01-10000$ ; в обычных ед:  $w_0 = m^2 e^3 c / \hbar^3 Z^3$ ). Зависимость энергии атома от напряженности магнитного поля имеет сложный вид, в частности, имеют место квазипересечения уровней как одна из характерных особенностей квантовых хаотических систем. [3–6]. Остановимся кратко на основных моментах нашего метода. (см. детали в [10–12]).

Гамильтониан в цилиндрических координатах  $(\rho, z)$  имеет стандартный вид (используются атомные единицы:  $e=\hbar=m=1$ ; магнитное поле направлено вдоль оси  $z$ ) [10]:

$$H \psi(\rho, z) = E \psi(\rho, z)$$

$$\begin{aligned} H = & -1/2(\partial^2 / \partial \rho^2 + 1/\rho \partial / \partial \rho + \partial^2 / \partial z^2 - \\ & - m^2 / \rho^2) + V(\rho, z), \\ V(\rho, z) = & -(\rho^2 + z^2)^{-1/2} + 1/8 \omega^2 \rho^2 + \\ & + \omega m / 2 + V_c(\rho, z); \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $m$  – магнитное квантовое число ( $m=0,1,2,\dots$ );  $V_c$  – эффективный потенциал, описывающий поле электронных оболочек атома. Потенциал  $1/8 \omega^2 \rho^2$  ограничивает движение в направлении перпендикулярном направлению поля. После аналитического интегрирования по углу двумерное  $(\rho, z)$  уравнение Шредингера решается ко-

нечно-разностным методом (выбор области на плоскости, способ аппроксимации производных метод решения уравнений, использование метода Ричардсона, применение неравномерных сеток, т.д. рассмотрены в [14, 17]). Ширина  $G$  уровня в магнитном поле далее определяется стандартно как  $\text{Im } E = G/2 = \pi < \Psi_{E_b} | H | \Psi_{E_s} >^2$  с полным гамильтонианом (1). Результаты расчета полной энергии (в атомных единицах) атома Ne при различных значениях параметра магнитного поля  $Y$  в основном  $|0_N >$  состоянии приведены в таблице 1 (см. классификацию в [1, 6, 8]). Единственным аналогичным расчетом, выполненным в двухмерном Хартри-Фоковском приближении является работа [6], результаты которой также приведены в таблице 1. Обращает на себя внимание достаточно значительная разница в значениях энергий, что в отсутствие эксперимента, еще раз показывает крайнюю сложность задачи. В таблице 2 приведены результаты расчета полных энергий (в ат.ед.) некоторых нейтральных атомов (в основном состоянии) в сильном магнитном поле, а также аналогичные данные, полученные на основе расчета в двухмерном Хартри-Фоковском приближении [6]. Из расчетов атомов в свободном состоянии известно, что хартри-фоковское приближение, как правило, по абсолютной величине занижает значения энергии системы. Анализ полученных данных пока-

зывает, что зависимость величины полной энергии соответствующих состояний атома от значений параметра магнитного поля  $Y$  имеет крайне сложный характер. В частности, имеют место квазипересечения кривых зависимости энергии состояний  $|0_N >$  и  $|2p_0 >$  атома неона от величины магнитного поля при  $Y=161.315$ , состояний  $|2p_0 >$  и  $|1s^2 >$  при  $Y=41.980$ , что является одной из характерных особенностей квантовых хаотических систем [3]. Сценарий перехода от регулярной динамики к хаосу выглядит следующим образом. При полях, меньших критического  $w_c$ , имеет место движение по инвариантным кривым, отвечающим периодическому движению электрона по траекториям. При увеличении значения поля структура траекторий меняется с появлением многократных пересечений. При дальнейшем росте величины поля происходит расширение слоя, перемежающегося с областями регулярного движения, и заполнение всей области разрешенного движения в фазовом пространстве. В результате в системе реализуется динамический хаос. В таблице 3 приведены значения напряженности магнитного поля (параметр  $\gamma$ ; в ат.ед.), соответствующие пересечениям уровней энергии в нейтральных атомах (заряд  $Z=2-10$ ). Подчеркнутые значения относятся к основному состоянию.

Таблица 1. Полная энергия (ат. ед.) основного состояния  $|0_N >$  атома неона в сильном магнитном поле

Магн. поле→	$Y=50$	$Y=100$
[6]	-176,964	-226,976
Наст. работа	-178,254	-228,524
Магн. поле→	$Y=1000$	$Y=10000$
[6]	-547,259	-1278,62
Наст. работа	-548,880	-1280,53

Таблица 2. Энергии (в ат. ед.) некоторых нейтральных атомов (в основном состоянии) в сильном магнитном поле

Z	Метод	$\gamma = 1$	$\gamma = 5$	$\gamma = 10$
2	[6]	-2.9597	-4.6173	-5.8295
	Наст.р-га	-2.9624	-4.6224	-5.8406
3	[6]	-6.5708	-9.5769	-11.9390
	Наст.р-га	-6.5822	-9.5901	-11.9534
4	[6]	-11.7288	-16.3069	-20.0175
	Наст.р-га	-11.7325	-16.3231	-20.0370
5	[6]	-18.4581	-24.8396	-30.0636
	Наст.р-га	-18.4690	-24.8642	-30.0912
6	[6]	-26.7843	-35.1815	-42.0799
	Наст.р-га	-26.8002	-35.2109	-42.1013
7	[6]	-36.7230	-47.3314	-56.0631
	Наст.р-га	-36.7428	-47.3600	-56.0964
8	[6]	-48.2846	-61.2866	-72.0064
	Наст.р-га	-48.3116	-61.3492	-72.0524

Таблица 3. Значения параметра  $Y$  (в ат.ед.), соответствующие пересечениям уровней энергии в нейтральных атомах (заряд  $Z=2-10$ ).

Z	$ 0_N\rangle- 1s^2\rangle$	$ 0_N\rangle- 2p_0\rangle$	$ 2p_0\rangle- 1s^2\rangle$	$ 2p_0\rangle- 1s^2 2p_0\rangle$	$ 2p_0\rangle- 2p_0 3d_{-1}\rangle$	$ 2p_0 3d_{-1}\rangle- 1s^2\rangle$
2	<u>0.75</u>					
3	<u>2.24</u>					
4	<u>4.62</u>	2.54	4.77			
5	<u>8.04</u>	7.95	8.06			
6	12.62	<u>18.69</u>	<u>12.28</u>			
7		<u>36.88</u>	17.36	<u>17.41</u>		
8		<u>64.76</u>	23.38	<u>23.34</u>		
9		<u>104.67</u>	30.32	<u>31.76</u>	22.76	30.63
10		<u>159.14</u>	38.18	<u>40.69</u>	40.55	38.16

## Литература

1. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, *Квантовая механика* (Наука, М. 1989.)
2. В.С.Лисица, *УФН* **153**, 379 (1987).
3. M.Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, New York. 1990.)
4. D.Kleppner, I.Chun-Ho, G.R.Welch, in: *Irregular Atomic Systems and Quantum Chaos*, Ed. J.Gay (Academic Press, New York. 1990.)
5. D.Delande, A.Bommier, J.C. Gay, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 141 (1991).

6. M.V.Ivanov, P.Schmelcher, *Phys.Rev.A* **61**, 022505 (2000).
7. K.Dupret, J.Zakrzewski, D.Delande, *Europhys. Lett.* **31**, 251 (1995).
8. A.V.Glushkov, L.N.Ivanov, *J.Phys.B.* **26**, L379 (1993).
9. G.V.Gadiyak, Yu.E.Loikov, A.I.Maschenko, M.S.Obrekht, *Opt.Spectr.* **56**, 26 (1984).
10. A.V.Glushkov, I.V.Kuklina, B.Boulham, in: *Proc. VII Intern. Conf. on Atomic Physics*, (EPS, Firenze, 2000), p.351.
11. I.V.Kuklina, in: *Proc. 5th Int. Workshop "Quantum Systems in Chemistry and Physics*, (Univ.Uppsala, Uppsala, 2000), p.133.
12. V.P.Kuklina, V.G.Shevchuk, *Наук. вісник Ужг. унів. Сер. Фіз.* **8**, 371 (2000).

## STOCHASTIC DYNAMICS OF ATOMIC SYSTEMS IN A MAGNETIC FIELD

I.V.Kuklina

Odesa State Polytechnical University, P.O.Box 116, Odesa-9, 65009  
e-mail: glushkov@paco.net

On the basis of the numeric solution of Schrödinger equation the calculation of the multielectron neutral atom (nuclear charge  $Z=2-10$ ) total energy is carried out for different values of static magnetic field. The dependence of total energy upon the field strength has a complicated form. In particular, quasi-crossovers were found as a characteristic feature of quantum chaotic systems.