

ВИЗНАЧЕННЯ ЕНЕРГІЇ ЗВ'ЯЗКУ ОСНОВНОГО СТАНУ ОДНОВИМІРНОГО АТОМУ ГЕЛІЮ У ГІПЕРСФЕРИЧНОМУ ПІДХОДІ

М.І.Гайсак^{1,2}, В.В.Онисько², Г.І.Рошко²

¹Інститут електронної фізики НАН України,
вул. Університетська, 21, Ужгород, 88017
e-mail hmi@iep.uzhgorod.ua

²Ужгородський національний університет, вул. Підгірна, 46, Ужгород, 88000

Отримано енергію зв'язку основного стану одновимірного атому гелію у гіперсферичному адіабатичному підході. При визначенні адіабатичних потенціалів, логарифмічні розбіжності у матричних елементах оператора потенціальної енергії усунуто за допомогою теорії лишків, що привело до комплексних їх значень. Для малих значень радіальної змінної виявлено додаткову область притягання, ширина якої залежить від розмірності базису, на якому визначаються адіабатичні потенціали. Одержані результати порівнюються із розрахунками, проведеними у інших підходах.

Ефекти, зумовлені кореляційними та обмінними взаємодіями у малочастинкових системах, відіграють важливу роль у сучасній квантовій фізиці. Для тричастинкових систем, які взаємодіють за законом Кулона, такі ефекти можна детально дослідити. У роботі Лапідуса [1] проведено розрахунки енергії зв'язку основного стану одновимірного атому гелію на основі використання варіаційного методу. Амадо і Коелго [2] провели розрахунок цієї ж енергії у одноканальному наближенні методу гіперсферичних координат (ГСК).

У даній роботі в рамках адіабатичного підходу методу ГСК проводиться дослі-

дження впливу зв'язаних каналів на величини енергії зв'язку основного стану одновимірного атому гелію. Аналіз симетрії гамільтоніану системи показує, що існують дві системи базисних функцій за кутовими змінними, які дозволяють достатньо точно оцінити величину внесків зв'язаних каналів у енергію зв'язку основних станів, хвильові функції яких є симетричними, або антисиметричними відносно перетворень, пов'язаних із перестановкою частинок.

Нерелятивістське рівняння Шредінгера для одновимірного атому гелію у атомній системі одиниць ($m_e = \hbar = e = 1$) має наступний вигляд:

$$\left[-\frac{1}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{1}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} - \frac{1}{2m_3} \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + V(x_1, x_2, x_3) \right] \Psi(x_1, x_2, x_3) = E \Psi(x_1, x_2, x_3), \quad (1)$$

де x_i та m_i – положення та маса i -ої частинки відповідно, E – повна енергія системи, $V(x_1, x_2, x_3)$ – потенціальна енергія взаємодії між частинками, яка має вигляд:

$$V(x_1, x_2, x_3) = -\frac{2}{|x_1 - x_2|} - \frac{2}{|x_1 - x_3|} + \frac{1}{|x_2 - x_3|}. \quad (2)$$

Вигляд потенціальної енергії (2) дозволяє відокремити рух системи центру мас у рівнянні Шредінгера (1). Для цього необхідно перейти від координат (x_1, x_2, x_3) до відносних координат Якобі (ρ, τ) та до координати системи центру мас (\mathfrak{R}) за формулами:

$$\rho_k = \tilde{d}_k (x_i - x_j), \quad \tau_k = d_k \left(x_k - \frac{m_i x_i + m_j x_j}{m_i + m_j} \right), \quad \mathfrak{R} = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2 + m_3 x_3}{m_1 + m_2 + m_3}, \quad (3)$$

де індекси (i, j, k) утворюють циклічну перестановку чисел $(1, 2, 3)$, d_k – константи, які забезпечують простоту рівняння відносного руху частинок.

Відокремивши рух системи центру мас, отримуємо рівняння для відносного руху частинок:

$$\left(-\frac{1}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \right) - \frac{2\tilde{d}}{\left| \tau + \frac{m_3 \rho \tilde{d}}{m_{23} d} \right|} - \frac{2\tilde{d}}{\left| \tau - \frac{m_2 \rho \tilde{d}}{m_{23} d} \right|} + \frac{d}{|\rho|} - \varepsilon \right) \varphi(\rho, \tau) = 0, \quad (4)$$

де хвильова функція системи $\Psi(x_1, x_2, x_3) = \chi(\mathfrak{R})\varphi(\rho, \tau)$ факторизується, а хвильова функція системи центру мас $\chi(\mathfrak{R})$ задовольняє рівняння Гельмгольца, розв'язки якого добре відомі [3], ε – енергія відносного руху. Розв'язок рівняння (4) зручно шукати у полярній системі координат $R = \sqrt{\rho^2 + \tau^2}$ ($0 \leq R < \infty$), $\text{tg} \alpha = \frac{\rho}{\tau}$ ($0 \leq \alpha < 2\pi$), у якій рівняння (4) набуває наступного вигляду:

$$\left\{ \frac{1}{2\mu} \left[\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left(R \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \right] + [\lambda^2 - V(R, \alpha)] \right\} \varphi(R, \alpha) = 0 \quad (5)$$

Для одержання адиабатичних потенціалів використовується метод Бубнова – Гальоркіна. Матричні елементи оператора потенціальної енергії мають логарифмічні розбіжності. Для усунення цих розбіжностей використано метод теорії лишків [4]. При цьому адиабатичні потенціали $(U_v(R))$ та каналові функції $(\chi_v(R))$ стають комплексними величинами, які є розв'язками наступної параметричної крайової задачі:

$$\left[\frac{d^2}{d\alpha^2} + 2\mu R^2 (U_v^2(R) - V(R, \alpha)) \right] \chi_v(R, \alpha) = 0, \quad (6)$$

з крайовими умовами Діріхле або Неймана.

Каналові функції, що описують синглетні стани, представимо у вигляді ряду за базисними функціями, які є розв'язками рівняння (6) при відсутності взаємодії між частинками. Для парних функцій у якості базисних розглянемо $\cos(2n\alpha)$, а для непарних – $\sin(2n+1)\alpha$, $n=0, 1, 2, \dots$. Для триплетних парних і непарних станів базисними функціями є $\sin 2n\alpha$ та $\cos(2n+1)\alpha$.

Так, наприклад, для основної синглетної серії ($\cos(2n\alpha)$) виявлено структуру в реальній частині адиабатичного потенціалу, яка обумовлена зв'язком між

каналами. Залежність реальної та уявної частин адіабатичного потенціалу від радіуса подано на рисунку 1. Як видно з рисунка, уявна частина адіабатичного потенціалу є додатною величиною, а реальна частина набуває як додатних, так і від'ємних знаків у певних областях зміни

полярного радіуса. Негативне значення реальної частини адіабатичного потенціалу відповідає силам притягання між частинками. Ширина області відштовхування залежить від розмірності базису, на якому визначаються адіабатичні потенціали.

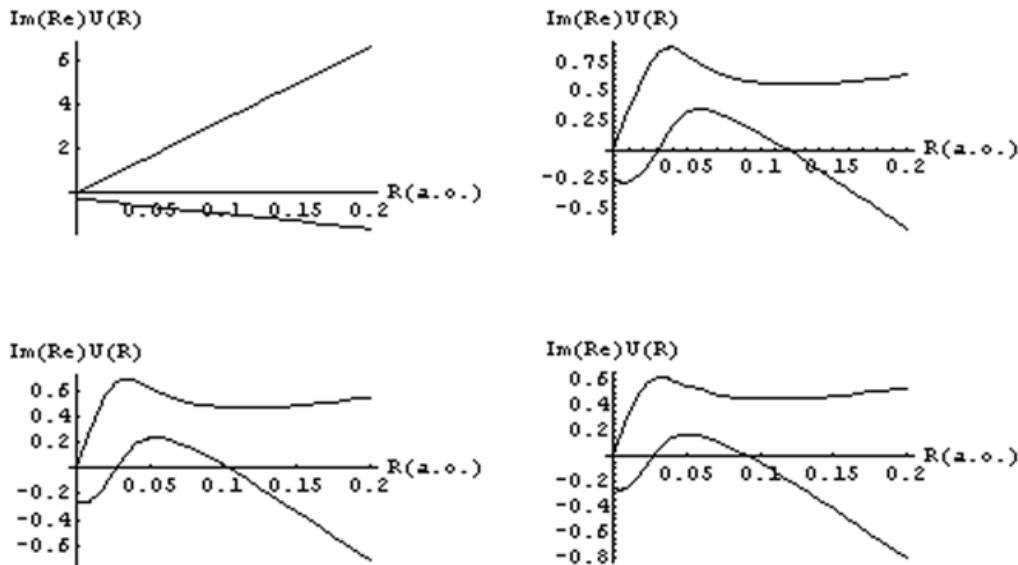


Рис 1. Залежність реальної та уявної частин адіабатичного потенціалу від радіуса для основного парного стану одновимірного атому гелію, які отримані при розмірності базису рівній 1, 2, 4, 10.

Таблиця 1.

Залежність значення енергії зв'язку (R_y) для парних і непарних станів одновимірного атому гелію від розмірності базису, при якому визначені адіабатичні потенціали

Стани	$N=2$	$N=5$	$N=10$	інші підходи	Експ.	$\langle r^2 \rangle$	$\langle r \rangle$
$^1S^o(1s^2)$	6.985927	7.395257	7.512329	6.125 [1]	5.8744	0.840773	0.750043
$^1S^e(1s^2)$	7.413323	7.493862	7.486521	3.49 [2]		0.843886	0.753272

Отримавши адіабатичні потенціали, ми можемо визначити енергію зв'язку основного $^1S^o$ -стану одновимірного атому гелію. У даній роботі ми прийняли до уваги лише реальні частини адіабатичного потенціалу. Відомо, що уявні частини потенціалу приводять до додаткового зсуву енергетичних рівнів та появи у них уявної частини, яка

опису час життя даного рівня [5]. Значення енергії зв'язку для парних та непарних основних станів одновимірного атому гелію наведено у таблиці 1. Там же представлені дані, отримані в роботах [1,2]. Знайдені радіальні хвильові функції дають можливість розрахувати середні $\langle r \rangle$ та середньоквадратичні $\langle r^2 \rangle$ радіуси даної системи, зна-

чення яких теж наведені у таблиці. Ці значення розраховано при розмірності базису, рівній 10.

Як видно з даних таблиці, різниця між значеннями енергії, отриманими для парних та непарних основних станів зменшується при збільшенні розмірності базису, на якому діагностується гамільтоніан системи. Отримані нами значення енергій знаходяться у задовільному узгодженні із значеннями, отриманими у варіаційному підході [1], та значно більші за значення, отримані у методі K -гармонік з $K=0$ [2]. Розбіжності між отриманими значеннями та значеннями, одержаними у роботі [2], становлять значний інтерес для проведення оцінки внеску уявних частин адіабатичних потенціалів у значення реальної та уявної частин енергії основного стану. Такі оцінки буде проведено у наступній роботі.

Таким чином, адіабатичний гіперсферичний підхід дає можливість послідовно усунути розбіжності у матричних елементах оператора потенціальної енергії та отримати комплексні адіабатичні потенціали. Аналіз цих потенціалів показав, що зв'язок між каналами приводить до існування області відштовхування, яка розділяє області притягання між частинками для малих та середніх значень радіальної змінної. Ширина області відштовхування залежить від розмірності базису, який використовується при визначенні адіабатичних потенціалів. Знайдені реальні частини адіабатичних потенціалів дали змогу обчислити енергії зв'язку основних $^1S^{o,e}$ -станів одновимірного атому гелію. Аналогічні розрахунки можна провести і для триплетних $^3S^{o,e}$ -станів.

Література

1. I.R Lapidus, Am. J. Phys. 43, 790 (1975).
2. D.R. Amado, H.T. Coelho, Am. J. Phys. 46, 1057 (1978).
3. Д.А. Варшалович, А.Н Москалёв, В.К. Херсонский, Квантовая теория углового момента (Наука, Москва, 1975).
4. Б.А. Фукс, Б.В. Шабат, Функции комплексного переменного и некоторые их приложения (ФМЛ, Москва, 1959).
5. М. Гольдбергер, К. Ватсон, Теория столкновений (Мир, Москва, 1967).

DETERMINATION OF BINDING ENERGY OF THE GROUND STATE FOR ONE-DIMENSIONAL HELIUM ATOM IN HYPERSPHERICAL APPROACH

M.I.Haysak¹, V.V.Onysko², G.I.Roshko²

¹ Institute of Electron Physics, Ukr. Nat. Acad. Sci.,
Universytetska St. 21, Uzhhorod, 88000
e-mail: nuclear@email.uz.ua

² Uzhhorod National University, Voloshina St. 54, Uzhhorod, 88000

Ground state binding energy for one-dimensional helium atom has been obtained in hyperspherical adiabatic approach. Logarithmic divergences in matrix elements of the potential energy operator were removed using the theory of residue, which led to the appearance of their complex values. An additional region of attraction was found for small values of radial variable. The width of this region depends on the dimension of basis, on which the adiabatic potentials are determined. The present results are compared with the calculations obtained in other approaches.