

ЕНЕРГІЇ ЗВ'ЯЗКУ НИЖЧИХ НЕПАРНИХ КВАНТОВИХ СТАНІВ НЕГАТИВНОГО ІОНА ВОДНЮ В ОДНОВИМІРНОМУ ПРОСТОРИ

М.Гайсак¹, М.Чундак²

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

² Ужгородський національний університет, вул. Волошина, 54,
Ужгород, 88000

У рамках адіабатичного підходу методу гіперсферичних функцій знайдено енергії зв'язку основного та нижчих автоіонізаційних станів негативного іона атома водню з використанням еліптичної системи координат. Адіабатичні потенціали визначені шляхом діагоналізації гамільтоніану системи з використанням власних функцій оператора узагальненого кутового моменту при різних розмірностях базису. Радіальне рівняння у наближенні Борна-Оппенгеймера розв'язано чисельно. Одержані енергії зв'язку задовільно узгоджуються з наявними експериментальними результатами та теоретичними розрахунками у інших підходах, проведених для тривимірного простору.

Вступ

Побудова послідовної теорії багатьох взаємодіючих частинок є актуальною задачею сучасної квантової фізики [1]. Це зумовлено рядом причин, які стимулюють проведення побудови загальної теорії N-тіл серед яких слід назвати, наприклад, стрімкий розвиток досліджень надструктур [2]. Серед сучасних теоретичних квантових методів досліджень багаточастинкових систем важливе місце посідає метод гіперсферичних функцій [3], який часто називають методом гіперсферичних координат. Основною перевагою цього методу є використання колективних координат у багатоконфігураційному просторі, що приводить до виходу за рамки одночастинкового наближення. Цей метод дозволяє наближено відокремити радіальний рух частинок системи від кутового, що значно спрощує знаходження наближених розв'язків нерелятивістського рівняння Шредінгера. Не менш важли-

вою перевагою цього методу є те, що він дає можливість проведення природної класифікації квантових станів системи, яка ґрунтується на симетрійних властивостях власних функцій оператора Казіміра групи $O(n)$.

У даній роботі розглянемо квантовомеханічну задачу для системи трьох заряджених частинок, маси яких рівні m_1, m_2, m_3 , а заряди q_1, q_2 та q_3 , відповідно, в одновимірному просторі. Взаємодія між частинками здійснюється за законом Кулона. Нерелятивістське рівняння Шредінгера в атомній системі одиниць ($m_e = \hbar = e = 1$) має наступний вигляд:

$$\left[\sum_{i=1}^3 \left(-\frac{1}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right) + \sum_{i,j=1, (i < j)}^3 \frac{q_i q_j}{|x_i - x_j|} \right] \Psi(x_1, x_2, x_3) = E \Psi(x_1, x_2, x_3), \quad (1)$$

де x_i – положення i – ої частинки, Ψ – хвильова функція системи, а E – повна енергія системи.

Рівняння (1) допускає відокремлення руху системи центра мас. Для цього введемо відносні координати Якобі, що задаються співвідношеннями:

$$\rho = d_1(x_2 - x_3), \quad \tau = d_2 \left(x_1 - \frac{m_2 x_2 + m_3 x_3}{m_{23}} \right), \quad \mathfrak{R} = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2 + m_3 x_3}{M}, \quad (2)$$

де ρ і τ – відносні відстані між другою і третьою частинками та між першою частинкою та системою центра мас другої і третьої частинок, відповідно, \mathfrak{R} – положення системи центра мас, d_1 і d_2 – константи, які визначаються із умови діагона-

лізації гамільтоніана системи у відносних змінних, M – повна маса системи, $m_{ij} = m_i + m_j$. У системі координат Якобі рівняння Шредінгера (1) набуде вигляду:

$$\left[\left(-\frac{1}{2\mu_1} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{2\mu_2} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - \frac{1}{2\mu_3} \frac{\partial^2}{\partial \mathfrak{R}^2} \right) + V(\rho, \tau) \right] \Psi(\rho, \tau, \mathfrak{R}) = E \Psi(\rho, \tau, \mathfrak{R}), \quad (3)$$

де μ_1 , μ_2 і μ_3 – константи, які виражаються через маси частинок системи наступними співвідношеннями:

$$\mu_1 = \frac{m_2 m_3}{d_1^2 m_{23}}, \quad \mu_2 = \frac{m_1 m_{23}}{d_2^2 M}, \quad \mu_3 = M,$$

а

$$V(\rho, \tau) = -\frac{d_1}{|\rho|} + \frac{1}{\left| \frac{\tau}{d_2} + \frac{\rho}{2d_1} \right|} + \frac{1}{\left| \frac{\tau}{d_2} - \frac{\rho}{2d_1} \right|}$$

– потенціальна енергія взаємодії.

Розв'язки рівняння (3) будемо шукати у вигляді $\Psi(\rho, \tau, \mathfrak{R}) = \psi(\rho, \tau) \phi(\mathfrak{R})$. Відокремивши змінні, одержимо еквівалентну систему рівнянь для функцій відносного руху ψ та функції руху системи центра мас ϕ , а саме:

$$\begin{cases} \left[-\frac{1}{2\mu_1} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{2\mu_2} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V(\rho, \tau) \right] \psi(\rho, \tau) = \varepsilon \psi(\rho, \tau), \\ \left(\frac{1}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathfrak{R}^2} + E - \varepsilon \right) \phi(\mathfrak{R}) = 0, \end{cases} \quad (4)$$

де ε – енергія відносного руху системи.

Перше рівняння описує відносний рух системи, а друге – рух системи центра мас.

Частинні розв'язки другого рівняння (4) добре вивчені [4], оскільки воно є рівнянням Гельмгольца. Таким чином, для знаходження енергій квантових станів системи необхідно знайти частинні розв'язки лише першого рівняння системи (4). Для цього зручно перейти до еліптичної системи координат [5], а саме:

$$R = \sqrt{\mu_1 \rho^2 + \mu_2 \tau^2}, \quad \alpha = \arctg \frac{\sqrt{\mu_1} \rho}{\sqrt{\mu_2} \tau}, \quad (0 \leq R < \infty, 0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2}). \quad (5)$$

У змінних (5) рівняння відносного руху системи набуде вигляду:

$$\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left(R \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \right) + V(R, \alpha) - \varepsilon \right] \psi(R, \alpha) = 0. \quad (6)$$

В якості базису для знаходження частинних розв'язків рівняння (6) виберемо власні функції і власні значення оператора, який отримується із рівняння (6) при фіксованому значенні R , тобто

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - 2R^2 V(R, \alpha) + 2R^2 U_v(R) \right) \chi_v(R, \alpha) = 0, \quad (7)$$

де $U_v(R)$ – адіабатичні потенціали, які параметрично залежать від R , а $\chi_v(R, \alpha)$ – каналові функції, v – квантове число, яке характеризує частинні розв'язки рівняння (7).

Задачу Діріхле для власних значень та власних функцій рівняння (7) для непарних квантових станів можна звести до розв'язування системи однорідних алгебраїчних рівнянь за допомогою методу Бубнова-Гальоркіна [6]. Для цього слід роз-

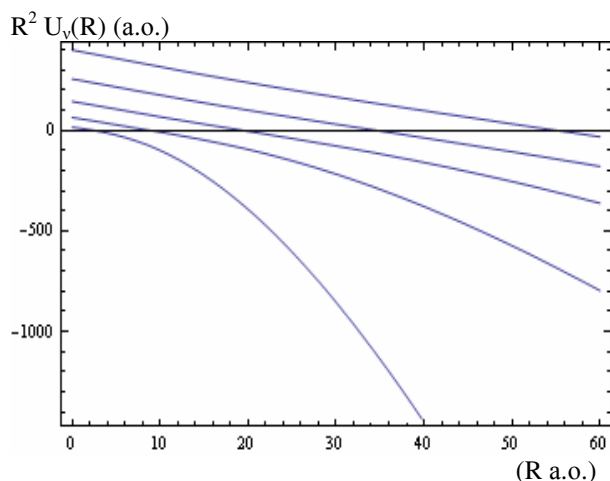


Рис.1. Залежність нижчих п'яти адиабатичних потенціалів від параметра R для непарних термів негативного іона атома водню

класти каналову функцію за базисом

$$\left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sin(4n\alpha) \right\}.$$

На Рис. 1 приведено залежність п'яти нижчих адиабатичних потенціалів від параметра R при розмірності базису рівній 100. Як видно із рис. 1 кожен із п'яти адиабатичних потенціалів має область притягання для значень параметра R більших за 4, 10, 20, 35, 55 а.о., відповідно. Найнижчий непарний квантовий стан містить перший потенціал. Чисельні розрахунки енергій у наближенні Борна-Оппенгеймера показали, що при збільшенні розмірності базису при розв'язуванні задачі Діріхле значення власної енергії зменшується. Результати чисельних розрахунків для нижчих рівнів серій: 1sns та 2sns наведено у

Таблиця 1. Залежність енергії ($-E$ а.о.) непарних негативних станів від розмірності базису при визначення адиабатичних потенціалів

Стани системи	Розмірність базису						Extr.	
	2	4	8	25	50	100		
$^3S(1s2s)$	0.3168	0.3993	0.4519	0.4881	0.4952	0.4981	0.5006	0.4859 [7] 0.478 [8]
$^3S(1s3s)$	0.2333	0.3274	0.4038	0.4710	0.4871	0.4944	0.5012	
$^3S(1s4s)$	0.1795	0.2743	0.3635	0.4544	0.4788	0.4906	0.5021	
$^3S(2s3s)$	0.0145	0.0664	0.0952	0.1173	0.1219	0.1238	0.1254	0.1271 [9]
$^3S(2s4s)$	0.0110	0.0538	0.0824	0.1108	0.1185	0.1222	0.1258	0.1251 [9]

Таблиці 1. Як видно з таблиці, енергії станів серії 1sns зі збільшенням розмірності базису наближаються до порогу іонізації атома водню. Застосовуючи формулу екстраполяції за Річардсоном до цих даних, одержаних при розмірності базису 2, 4, 8, одержуємо енергію стану 1s2s – 0.5169 а.о., що відповідає енергії зв'язку – 0.46 еВ, а з результатів, одержаних при розмірності базису 25, 50, 100 – 0.016 еВ. Для однозначної відповіді на питання де знаходиться енергетичні непарні стани серії 1sns ($n = 2, 3, \dots$) негативного іона водню - під порогом, або над порогом, -

необхідно дослідити величину міжканалового зв'язку, тобто врахувати внесок неадиабатичних потенціалів. Порівняння наших розрахунків з розрахунками проведеними у роботах [7-9] показує, що відносна похибка не перевищує 3%.

Таким чином, отримані результати засвідчують, що навіть у наближенні Борна-Оппенгеймера для системи трьох частинок, які знаходяться в одновимірному просторі, енергія квантових станів наближено співпадає з енергією відповідних станів, що отримані для тривимірного простору.

Література

1. К.Остен-Бакен, І.Зайонц, УФЖ 36, 987 (2001).
2. O.V.Ladden, Radiative Recombination in Semiconductors (Springer, Berlin, 2003).
3. C.D.Lin, Hyperspherical coordinate approach to atomic and other three-body systems // Phys.Rev.A. **257**, 1 (1995).
4. Д.А.Варшалович, А.Н.Москальов, В.К.Херсонский, Квантовая теория углового момента (Наука, Ленинград, 1975).
5. Э.Т. Уиттекер, Дж. Н. Ватсон. Курс современного анализа т.2, (Ф-МЛ, Москва, 1963).
6. Л.В.Канторович, В.И.Крылов. Приближенные методы высшего анализа, (ТЕЛ, Москва, Ленинград, 1952).
7. G.R.Lowrey, R.D.Present, Search for a discrete excited triplet state of the negative hydrogen ion // ApJ. **125**, 611L (1957).
8. М.Гайсак, М.Довганич, В.Онисько, Вісник УжНУ, Серія фізика **8**, 173 (2000).
9. M.K.Chen Doubly excited resonant states in H^- below the $n = 2$ hydrogen threshold // J. Phys. B . **30**, 1669 (1997).

BINDING ENERGIES OF LOWER ODD STATES OF NEGATIVE HYDROGEN ION IN A ONEDIMENSIONAL SPACE

M.Haysak¹, M.Chundak²

¹ Institute of Electron physics, Ukr. Nat. Acad. Sci., Universitetska St. 21,
Uzhgorod, 88017
e-mail: hmi@iep.uzhgorod.ua

² Uzhgorod National University, Voloshyna St., 54, Uzhgorod, 28000

The binding energy values for ground and lower autoionizing states of the negative ion of hydrogen atom were found using an elliptic coordinate system in the framework of hyperspherical adiabatic approach. Adiabatic potentials were determined by diagonalization of the system's Hamiltonian on the ellipse using eigenfunctions of the generalized angular momentum operator at different dimensions of the basis. Radial equation in the Born-Oppenheimer approximation is solved numerically. The obtained binding energy values are in satisfactory agreement with the existing experimental results and theoretical calculations performed in other approaches.

