

ВИКОРИСТАННЯ ДВОВИМІРНОГО БАЗИСУ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ЕНЕРГІЙ АВТОІОНІЗАЦІЙНИХ СТАНІВ ГЕЛІЄПОДІБНИХ СИСТЕМ

М.І. Гайсак, М.М. Довганич, * В.В. Онисько

Інститут електронної фізики НАН України, 294016 Ужгород,
вул. Університетська, 21,

*Ужгородський державний університет, 294000 Ужгород, вул. Волошина, 54

У методі гіперсферичних координат введено двовимірний базис, який дозволив врахувати внесок кутових та радіальних кореляцій у значення спектроскопічних характеристик гелієподібних систем і провести класифікацію адиабатичних потенціалів за допомогою вузлових ліній каналових функцій. Виявлено точки перетину автоіонізаційних адиабатичних потенціалів. В одноканальному наближенні проведені розрахунки енергій нижчих автоіонізаційних станів серії $2s^2 \text{H}^+$ та серії $2s^2$ і $2p^2$ атома He.

Одним із ефективних методів дослідження кореляційного руху електронів у двоелектронних системах є метод гіперсферичних координат (ГСК) [1,2]. У статичному наближенні розв'язування нерелятивістського рівняння Шредінгера зручно проводити у сферичній системі координат шестивимірного конфігураційного простору. Як правило, для розв'язування такого рівняння використовують по-лісферичну параметризацію [1,2]. При такій параметризації каналові функції залежать від п'яти

кутових змінних. Використання обертової системи координат (див., наприклад, [3]) дозволяє зменшити кількість змінних до двох. В цій системі за незалежні змінні виберемо кути Ейлера (δ, β, γ), які характеризують систему як ціле, та відносні змінні: гіперрадіус (R), гіперкут (α) та кут між радіус-векторами електронів (θ), які задаються наступними співвідношеннями:

$$R = \sqrt{\vec{r}_1^2 + \vec{r}_2^2}, \quad \alpha = 2 \arctg \frac{r_1}{r_2}, \quad \theta = \arccos \frac{\vec{r}_1 \vec{r}_2}{r_1 r_2}, \quad 0 \leq \alpha \leq \pi, \quad 0 \leq \theta \leq \pi. \quad (1)$$

У атомній системі одиниць ($m_e = e = \hbar = 1$) рівняння Шредінгера для $^{1,3}\text{S}$ -станів у цих змінних набуває простого вигляду [3]:

$$\left[\frac{1}{R^5} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^5 \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{4}{R^2} \Lambda^2 - 2V(R, \alpha, \theta) + 2E \right] f(R, \alpha, \theta) = 0, \quad (2)$$

де

$$\Lambda^2 = \frac{1}{\sin^2 \alpha} \left[\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\sin^2 \alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] - \text{оператор квадрата узагальненого кутового моменту}$$

$$V(R, \alpha, \theta) = \frac{1}{R} \left[Z \left(\frac{1}{\sin(\alpha/2)} + \frac{1}{\cos(\alpha/2)} \right) - \frac{1}{\sqrt{1 - \sin \alpha \cos \theta}} \right] - \text{оператор потенціальної взаємодії}$$

електронів з ядром та між собою, Z - заряд ядра.

Задача на власні значення та власні функції оператора Λ^2 :

$$\Lambda^2 \varphi_{nm}(\alpha, \theta) = \lambda \varphi_{nm}(\alpha, \theta) \quad (3)$$

має аналітичний розв'язок, що виражається через відомі спеціальні функції, причому

$$\lambda = (n + m + 1)^2, \quad \varphi_{nm}(\alpha, \theta) = N_{nm} C_n^{(m)}(\cos \alpha) P_m(\cos \theta),$$

N_{nm} - константа нормування, $C_n^{(m)}(x)$, $P_m(x)$ - поліноми Гегенбауера та Лежандра степенів n і m відповідно. Власні функції оператора Λ^2 зручні для використання їх в якості базисних функцій при розв'язуванні рівняння (2), якщо потенціал взаємодії між частинками являється короткодіючим

$$\left[\Lambda^2 - R^2 \left(\frac{1}{2} V(R, \alpha, \theta) - U_\mu(R) \right) \right] \chi_\mu(R, \alpha, \theta) = 0. \quad (4)$$

Із (4) видно, що як власні функції $\chi_\mu(R, \alpha, \theta)$, так і власні значення (адіабатичні потенціали, АП) $U_\mu(R)$ параметрично залежать від гіперрадіуса, більше того, при $R = 0$ крайова задача (4) співпадає із задачею (3) і тим самим має аналітичний

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \chi_\mu(R, \alpha, 0) = \frac{\partial}{\partial \theta} \chi_\mu(R, \alpha, \pi) = \chi_\mu(R, 0, \theta) = \chi_\mu(R, \pi, \theta) = 0. \quad (5)$$

Індекс μ - система квантових чисел, які задають частинні розв'язки крайової задачі (4) - (5). Виявляється, що для визначення однозначного розв'язку задачі (4) - (5) необхідно ввести два квантових числа. Так, наприклад, частинні розв'язки задачі (3) визначаються числами n та m , що задають відповідно степені поліномів Гегенбауера та Лежандра, які, зокрема, показують парність та кількість нулів у частинному розв'язку за незалежними змінними. З фізичної точки зору зручніше ввести інші два квантових числа, а саме: $\sigma = n + m$ та $\rho = m - n$, які пов'язані із гіпермоментом $\sqrt{\lambda} = \sigma + 1$, а ρ співпадає із проекцією гіпермомента на вісь квантування. Таким чином, квантові числа σ та ρ задають мультиплет $^{1,3}S$ станів гелієподібних систем. Функції $\varphi_{nm}(\alpha, \theta)$ часто називають К-гармоніками, а каналові функції $\chi_\mu(R, \alpha, \theta)$ - гіперсферичними функціями. Підкреслимо, що індекс μ характеризує вузлові лінії каналових функцій.

Оскільки незалежні змінні визначені для обмеженої області, то спектр задачі (4) - (5) виключно дискретний, тому двовимірні каналові функції $\chi_\mu(R, \alpha, \theta)$ приваб-

$(V(R, \alpha, \theta) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} R^{-\nu}, \nu > 1)$. У нашому випадку - це кулонівський потенціал взаємодії ($\nu=1$), тому для базисних функцій слід використовувати так звані каналові функції, які є розв'язками наступної крайової задачі [1]:

розв'язок. Для інших значень гіперрадіуса задачу (4) можна розв'язати тільки чисельно. Накладемо на каналові функції $\chi_\mu(R, \alpha, \theta)$ граничні умови, такі ж самі, як на аналітичні розв'язки задачі (3) [3], а саме:

ливі для використання в якості базисних при розкладанні хвильової функції від двох незалежних змінних, які задані на поверхні сфери у тривимірному просторі. Це ще одна перевага методу ГСК перед методами, які ґрунтуються на одночастинкових підходах.

Для розв'язання задачі (4) - (5) скористаємось методом розв'язування двовимірної крайової задачі, який застосовується, наприклад, при визначенні власних частот коливання прямокутної пластинки змінної товщини [4]. При врахуванні потенціалу взаємодії між електронами зручно розкласти його в ряд за поліномами Лежандра і обмежитись певним числом доданків. В результаті виявилось, що для одержання АП з точністю 10^{-4} а.о. необхідно приймати до уваги перші чотири доданки такого розкладу. Отримані в такий спосіб АП та каналові функції дозволяють визначити вклад кореляційного руху електронів у спектроскопічні параметри малочастинкових систем.

При знаходженні частинних розв'язків рівняння (2) розкладемо $f(R, \alpha, \theta)$ за каналовими функціями, які визначаються розв'язком крайової задачі (4) - (5) тобто

$$f(R, \alpha, \theta) = \sum_{\mu} F_{\mu}(R) \chi_{\mu}(R, \alpha, \theta) \quad (6)$$

де $F_{\mu}(R)$ - невідомі функції, які задовольняють нескінченній системі диференціальних рівнянь другого порядку

$$\sum_{\nu} \left\{ \left[\frac{1}{R^5} \frac{d}{dR} \left(R^5 \frac{d}{dR} \right) + 4U_{\mu\nu}(R) - 2E \right] \delta_{\mu\nu} - \wp_{\mu\nu}(R) \right\} F_{\nu}(R) = 0, \quad (7)$$

з граничними умовами задачі на зв'язані стани $F_{\mu}(0) = F_{\mu}(R_{\max}) = 0$. Тут $\wp_{\mu\nu}(R) -$

неадіабатичні потенціали, які визначаються каналовими функціями [3]

$$\wp_{\mu\nu}(R) = \left\langle \chi_{\mu}(R, \alpha, \theta) \left| \frac{\partial^2}{\partial R^2} \chi_{\nu}(R, \alpha, \theta) \right. \right\rangle + \left\langle \chi_{\mu}(R, \alpha, \theta) \left| \frac{\partial}{\partial R} \chi_{\nu}(R, \alpha, \theta) \right. \right\rangle \frac{d}{dR}, \quad (8)$$

де дужками $\langle | \rangle$ позначено інтегрування за змінними α і θ з вагою $\sin^2 \alpha \cos \theta d\alpha d\theta$, а величина R_{\max} залежить від точності визначення розв'язку задачі (7).

Розв'язок системи диференціальних рівнянь (7) в повному обсязі - досить важка задача. На практиці часто використовують наближення Борна-Оппенгеймера та адіабатичне наближення. У наближенні Борна-Оппенгеймера нехтують залежністю каналових функцій від гіперрадіуса. Це приводить до того, що неадіабатичні потенціали (НАП) (8) рівні нулю і система радіальних рівнянь розщеплюється. В адіабатичному наближенні нехтують тільки недиагональними елементами у системі (7). Ці два наближення дають відповідно нижню та верхню границі для значень енергії даного каналу у вибраному наближенні.

У даній роботі в одноканальному наближенні знайдені АП та каналові функції адіабатичних серій $U_{2-2}(R)$, $U_{1-1}(R)$, $U_{3-1}(R)$, $U_{2-2}(R)$ та $U_{3-3}(R)$, які відповідають позначенням $2s^2$, $2p^2$, $3p^2$, $3d^2$ та $4f^2$ (див., наприклад, [1,2]), для від'ємного іона водню H^- і атома He. Крайова задача (3) розв'язувалась чисельно за допомогою методики, яка викладена у роботі [5]. Результати розрахунків нижчих АП для атома гелію, які збігаються до нижчих порогів збудження іона He^+ , наведені на рис. 1.

Як видно із рис.1, для АП, які збігаються до другого та третього порогів збудження іона гелію, спостерігаються точки перетину певних АП. Така ж картина має місце і для від'ємного іона водню. У околах точок перетину АП відбуваються найбільш ймовірно неадіабатичні переходи між відповідними термами. У стандартному підході [1,2] подібних точок перетину АП не спостерігається. Це пов'язано з тим, що при визначенні АП, як правило, використовується метод зведення цієї задачі до задачі діагоналізації матриці взаємодії на певному підпросторі функцій повного гільбертового простору. У даній роботі визначається частинний розв'язок крайової задачі (4) - (5), який при малих значеннях гіперрадіуса наближається до відповідного розв'язку рівняння (3). Відомо, що наявність точок перетину АП у теорії розсіювання важких часток обумовлює наявність додаткових осциляцій у повних та диференціальних перерізах таких реакцій [6]. Чисельно частота визначається площею петлі, яка утворюється при перетині адіабатичних термів. Безумовно, виникає інтерес до виявлення подібних осциляцій у перерізах розсіювання електрона на іоні He^+ , або електрона на атомі водню, оскільки вони пов'язані із двочастинковими переходами в атомних системах.

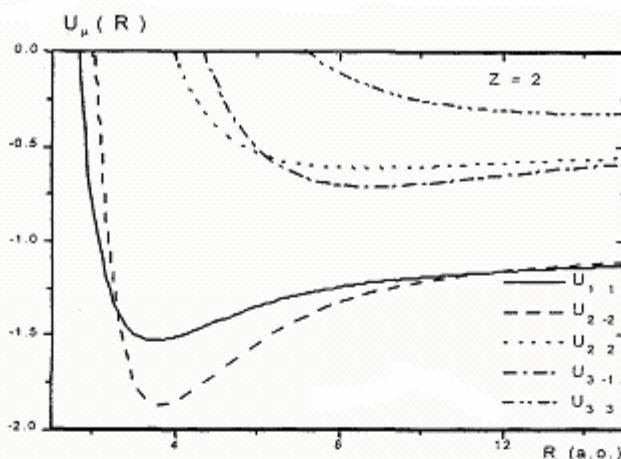


Рис.1 Залежність нижчих адиабатичних потенціалів від гіперрадіуса для атома гелію

У таблиці 1 наведені теоретичні розрахунки енергій нижчих автоіонізаційних 1S - станів для H^- серії $2s^2$, які отримані за допомогою відомих методів, що дозволяють врахувати кореляційних рух електронів, а також наявні експериментальні дані. В першій колонці подані значення енергій, що розраховані за допомогою методу комплексних обертань [7] та методу змішування конфігурацій [8]. У другій колонці вміщені результати, що отримані у багатоканальному підході методу ГСК [9]. У третій та четвертій колонках наведені дані, які отримані в даній роботі у наближенні Борна-Оппенгеймера, та наявні експериментальні дані. Маючи значення АП та каналових функцій, можна знайти енергії нижчих станів відповідних серій у наближенні Борна-Оппенгеймера і адиабатичному наближенні. Для визначення внеску НАП необхідно провести розрахунки НАП (8) і отримати значення енергій в адиабатичному наближенні. Результати розрахунків трьох нижчих станів адиабатичних серій - $2s^2$ ($U_{2-2}(R)$) від'ємного іона водню

і $2s^2$ ($U_{2-2}(R)$) та $2p^2$ ($U_{1-1}(R)$) для атома гелію наведені у таблицях 1-2. При визначенні енергій основних станів кожної серії інтегрування радіального рівняння слід проводити до значень гіперрадіусу, що дорівнюють десяткам а.о., в той час як при визначенні енергій збуджених станів інтегрування необхідно проводити до сотень а.о.. У табл.2 наведені значення енергій автоіонізаційних 1S - станів серій $2s^2$ та $2p^2$, які отримані методом проєкційних операторів [14], методом змішування конфігурацій [13], у багатоканальному підході методу ГСК [9], результати даних розрахунків у наближенні Борна-Оппенгеймера та адиабатичному наближенні, а також експериментальні дані.

Порівнюючи результати, які отримані у розглянутому наближенні, можемо переконатись, що запропонований двовимірний базис досить добре враховує кутові та радіальні кореляції, якщо прийняти до уваги, що для отримання цих результатів необхідно розв'язувати лише одне диференціальне рівняння другого порядку.

Табл.1 Енергії нижчих автоіонізаційних 1S - станів серії $2s^2$ для від'ємного іона водню (-E в а.о.)

Стани	Теор.розрах.	БК МГСК [9]	Дані розрах.	Експер. дані
$2S^2$	0.148782 [7]	0.148665	0.14945	0.14908 [10]
	0.148782 [8]			0.14879 [11]
$2S3S$	0.126021 [7]	0.125995	0.12603	0.14875 [12]
	0.126006 [8]			
$2S4S$	0.1250579 [7]	0.124909	0.12504	

БК МГСК - багатоканальний метод гіперсферичних координат.

Табл.2 Енергії нижчих автоіонізаційних 1S -станів серії $2s^2$ та $2p^2$ для атома He (-Е в а.о.)

Стани	Теор.розрах.	БК МГК [9]	Дані розрах.	Експер. дані
$2S^2$	0.7778 [13]	0.778824	0.76966 ^A	0.7789 [15]
	0.77876 [14]		0.78768 ^B	0.7789 [16]
$2S3S$	0.58986 [13]	0.590158	0.58243 ^A	0.5904 [15]
	0.59008 [14]		0.59862 ^B	0.5907 [16]
$2S4S$	0.54487 [13]	0.544863	0.54026 ^A	0.5437 [15]
	0.544918 [14]		0.54924 ^B	0.5452 [16]
$2P^2$	0.62052 [13]	0.621927	0.61655 ^A	0.6198 [15]
	0.622567 [14]		0.62128 ^B	0.6231 [16]
$2P3P$	0.54787 [13]	0.547582	0.54289 ^A	
	0.548187 [14]		0.54876 ^B	
$2P4P$	0.52762 [13]	0.526640	0.52630 ^A	
	0.52736 [14]		0.52935 ^B	

БК МГСК - багатоканальний метод гіперсферичних координат,

A - адіабатичне наближення, B - наближення Борна-Оппенгеймера.

Аналіз наведених результатів показує, що значення енергій автоіонізаційних станів, які отримані різними методами, дуже близькі між собою. Це свідчить про те, що при розрахунках враховано досить точно внесок кутових та радіальних кореляцій. Так, наприклад, у роботі [7] для врахування кутових кореляцій в базис включались сферичні гармоніки із значенням відносного кутового моменту до шостого порядку, а радіальні кореляції враховувались за допомогою B-сплайнів в області зміни радіальних змінних електронів від 0 до 640 а.о.. Більше того, для мінімізації кожного значення енергії вводився додатковий параметр, який характеризує ефективний заряд ядра q . Наприклад, для стану $2s^2$ він дорівнює 0.940, а значення енергії при цьому дорівнює - 0.1484 а.о. У нашому одноканальному наближенні отримане значення енергії дорівнює - 0.1494 а.о.. При отриманні даного значення енергії нами враховано вклад вищих монополів аж до октупольного включно. При розв'язуванні радіального рівняння інтегрування слід проводити до максимального значення гіперрадіуса - 345 а.о., що забезпечує точність енергії не

нижче 10^{-3} а.о.. Експериментальне ж значення енергій цього стану дорівнює - 0.1491 а.о. [5].

Аналізуючи наведені дані, бачимо, що використання двовимірного базису в наближенні Борна-Оппенгеймера ($\varphi_{\mu\nu}(R)=0$) дозволяє врахувати з високою точністю як кутові, так і радіальні кореляції, що забезпечує добре погодження теоретичного та експериментального значень енергії автоіонізаційного стану без введення будь-яких припасовочних параметрів. Більше того, знайдені нами НАП значно менші за аналогічні потенціали, які отримані у стандартному гіперсферичному підході [1,2]. Цей факт вказує також на те, що у даному підході зв'язок між каналами малий і його можна враховувати за допомогою теорії збурень.

Таким чином, використання двовимірного базису дозволяє вже в одноканальному наближенні отримати результати, які по точності врахування кутових та радіальних кореляцій еквівалентні багатоканальному підходу методу ГСК та іншим точним розрахункам, які ґрунтуються на варіаційному методі.

REFERENCES

1. J.H. Macek, *J.Phys.B* **1**, 831 (1968).
2. U. Fano, *Rep. Prog. Phys.* **46**, 97 (1983).
3. M.I. Haysak, M.M. Dovhanich, V.I. Lengyel, V.V. Onysko, *J.Phys.Stud.* **1**, 1 (1997).
4. М.И. Довганич, *Прикл. Механіка* **23**, 75 (1987).
5. М. Довганич, *Науково техн. Збірник, вип.3, Київ-Ужгород*, 256 (1997).
6. Б.А. Анкудинов, С.В. Бобашев, А.В. Перель, *ЖЭТФ* **60**, 2737 (1971).
7. M.K. Chen, *J.Phys.B* **30**, 1669 (1997).
8. T.N. Chang, X. Tang, *Phys.Rev. A* **44**, 232 (1991).
9. A.G. Abrashkevich, M.I. Haysak, I.V. Puzynin, S.I. Vinitsky, *Proc.of XIIth Conf. Few-Body Physics, Uzhgorod*, 141 (1990).
10. E. Lidroth, *Phys.Rev.A* **52**, 2737 (1995).
11. J.F. Williams, *Electron and Photon Interactions with Atoms*, New-York: Plenum, (1976).
12. L. Sanche, P.D. Barrow, *Phys.Rev.Lett. A* **29**, 1639 (1972).
13. D.H. Oza, *Phys.Rev.A* **33**, 824 (1986).
14. T.K. Chung, B.F. Davis, *Many-Body theory of atomic structure and photoionization*, *World Sc. Sinyapoure*, 408 (1993).
15. M.E. Rudd, *Phys.Rev.Lett.* **15**, 580 (1965).
16. P.J. Hicks, J. Comer, *J.Phys.B* **8**, 1866 (1975).

APPLICATION OF TWO-DIMENSIONAL BASIS FOR DETERMINATION OF AUTOIONIZATION STATES ENERGIES IN HELIUM-LIKE SYSTEMS

M.I. Haysak, M.M. Dovhanich, * V.V. Onysko

Institute of electron physics NAS Ukraine, 294016 Uzhgorod, str. Universitetska, 21

*Uzhgorod State University, 294000 Uzhgorod, str. Voloshina, 54

A two-dimensional basis have been introduced into the hyperspherical coordinates method which allows to account the contribution of angular and radial correlations into the values of spectroscopic characteristics in helium-like systems and perform the classification of adiabatic potentials by means of nodular lines of channel functions. Points of crossing of adiabatic autoionizing potentials were determined. Calculations of lower autoionization states energies have been performed for helium atom in the series $2s2$, $2p2$ - and serie $2s2$ for negative ion of hydrogen H^- .