01;02

Связанные состояния S-двухэлектронного атома

 А.А. Киселев, С.И. Никитин

С.-Петербургский государственный университет
E-mail: antchis@pcqnt2.phys.spbu.ru

Поступило в Редакцию 22 января 2002 г.

Рассмотрен выбор углов Эйлера, при котором одна из осей вращающейся системы координат тесно связана с центром масс электронов. Иерархия гиперсферических координат R, α и θ позволяет провести поочередное квантование по ним. Сложность структуры потенциала (R) приводит к использованию квазиклассического приближения.

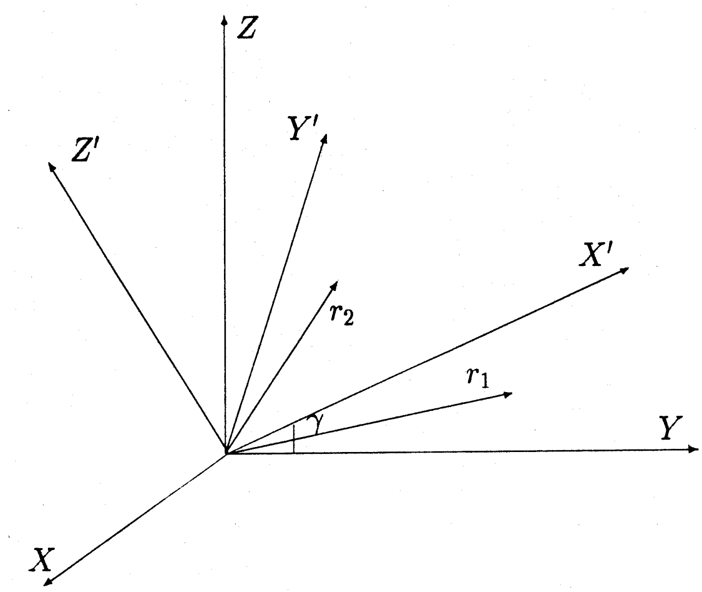
Определен спектр энергии дваждывозбужденных состояний атома гелия для S-состояний. Проведено сравнение полученных данных с другими работами.

Исследование возбужденных состояний двухэлектронного атома является достаточно актуальной проблемой атомной физики. Использование гиперсферического координатного базиса впервые было применено Фоком [1].

Келлман и Херрик [2] гипотетически рассмотрели атом гелия в дваждывозбужденном состоянии в виде аналога линейной симметричной трехатомной молекулы. В работе [3] впервые была предложена классификация дваждывозбужденных состояний с использованием квантовых чисел K и T.

Модель сферы, по поверхности которой $r_1 = r_2 = \text{const}$ движутся электроны, рассмотрена в [4,5]. Аналитическое исследование модельной задачи дано в [6]. Классификация дваждывозбужденных состояний, необходимая для сравнения аналитических расчетов с экспериментальными, дается в [3,7]. В [8–12] представлены данные значений энергии для различных состояний.

Поместим ядро в начало координат. Как уже указывалось, r_1 и r_2 — расстояния от ядра до первого и второго электронов соответственно. $X'Y'Z'$ — повернутая система координат. Как известно, углы Эйлера α, β и γ осуществляют последовательным образом поворот системы: вна-



Взаиморасположение систем координат и радиусов-векторов.

чале поворот на угол α вокруг оси Z, затем на угол β вокруг нового положения оси Y и, наконец, поворот на угол γ вокруг окончательного положения оси Z. На рисунке γ — угол между осями X' и Y, причем ось X' проходит через треугольник со сторонами r_1 и r_2. Будем рассматривать ось X' как медиану данного треугольника. Тогда изменится один из углов Эйлера — γ. Новый угол, обозначаемый через γ, будет отличаться от γ [6] на угол δ.

В дальнейшем используется атомная система единиц: $\hbar = m = e = 1$. Гамильтониан двухэлектронного атома имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{\lambda}{r_{12}}, \tag{1}$$

где Z — заряд ядра, а λ — параметр, близкий к 1. Разделение переменных проводится обычным способом с помощью формулы Вигнера–

Гиршфельдера:

$$\Psi_{LM}(r_1, r_2) = \sum_{K=0}^{L} f_{LK}^{+}(r_1, r_2) D_{MK}^{L+}(\Omega) + f_{LK}^{-}(r_1, r_2, \theta) D_{MK}^{L-}(\Omega),$$

где

$$\Omega = \{\alpha, \beta, \gamma\},$$

$$D_{MK}^{L+} = \left(\sqrt{2} + (2 - \sqrt{2})\delta_{ok}\right)^{-1} \left[D_{MK}^{L} + (-1)^K D_{M-K}^{L}\right],$$

$$D_{MK}^{L-} = (i\sqrt{2})^{-1} \left[D_{MK}^{L} - (-1)^K D_{M-K}^{L}\right]. \tag{2}$$

Здесь $\mathbf{L}$ — полный орбитальный момент, M — его проекция на ось Z и K — его проекция на ось Z'. Также надо упомянуть о том, что $\mathbf{L} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2$ и $\mathbf{l} = \mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2$, где $\mathbf{l}_1$ и $\mathbf{l}_2$ — орбитальные моменты электронов.

Это приводит к следующей системе уравнений:

$$\Bigg[\frac{1}{r_1^2}\frac{\partial}{\partial r_1} r_1^2 \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{1}{r_2^2}\frac{\partial}{\partial r_2} r_2^2 \frac{\partial}{\partial r_2} - \frac{2\sin\theta}{Q}\left(-Kr_2\frac{\partial}{\partial r_1} + Kr_1\frac{\partial}{\partial r_2}\right)$$

$$+ \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2}\right)\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{L(L+1) - K^2}{2\sin^2\theta}\right)$$

$$- \frac{2K^2}{Q} + \frac{2Z}{r_1} + \frac{2Z}{r_2} - \frac{2\lambda}{r_{12}} + 2E\Bigg] \cdot f_{LK}^{+} + \frac{1}{2\sin^2\theta}\left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2}\right)$$

$$\times \Big[\left(1 - \delta_{0K} - \delta_{1K} + (\sqrt{2} - 1)\delta_{2K}\right)\beta_{K-2}\beta_{K-1}e^{-2i\delta} f_{LK-2}^{+}$$

$$+ \left(1 + (\sqrt{2} - 1)\delta_{0K}\right)\beta_{-K-2}\beta_{-K-1}e^{2i\delta} f_{LK+2}^{+} + L(L+1)\delta_{1K} f_{LK}^{+}\Big]$$

$$+ \frac{2}{Q}\frac{r_1^2 - r_2^2}{r_1 r_2 \sin\theta}\Bigg[\frac{K}{2} - \frac{1}{2}(1 - \delta_{0K} - \delta_{1K} - \delta_{2K})\beta_{K-2}\beta_{K-1}e^{-2i\delta} f_{LK+2}^{-}$$

$$+ L(L+1)\delta_{1K} f_{LK}^{-} - \left(1 + (\sqrt{2} - 1)\delta_{0K}\right)\beta_{-K-2}\beta_{-K-1}e^{-2i\delta} f_{LK+2}^{-}$$

$$- \frac{2K^2}{Q} f_{LK}^{-} - \frac{K}{2}\sin 2\theta \frac{\partial}{\partial\theta} f_{LK}^{-}\Bigg]$$

$$+\frac{2}{Q}\Big(\big(1+(\sqrt{2}-1)\delta_{0K}\big)\beta_{-K-2}\beta_{-K-1}e^{2i\delta}f^{-}_{LK+2}\Big)$$

$$+\frac{2}{Q}\Big[\big(1-\delta_{0K}-\delta_{1K}-(\sqrt{2}-1)\delta_{2K}\big)\beta_{K-2}\beta_{K-1}e^{-2i\delta}f^{+}_{LK-2}$$

$$+\big(1+(\sqrt{2}-1)\delta_{0K}\big)\beta_{-K-2}\beta_{-K-1}e^{2i\delta}f^{+}_{LK+2}\Big]=0. \qquad (3)$$

$$Q=r_1^2+r_2^2+2r_1r_2\cos\theta$$

$$r_{12}=\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\theta}.$$

Рассмотрим S-состояние: $L=K=0$. Перейдем к новым переменным. В качестве таковых возьмем гиперрадиус $R=\sqrt{r_1^2+r_2^2}$, гиперугол $\alpha=\arctan\frac{r_1}{r_2}$, а θ оставим без изменений. Пересчитываем производные $\frac{\partial}{\partial r_1}$, $\frac{\partial}{\partial r_2}$, множитель $\frac{1}{r_1^2}+\frac{1}{r_2^2}$ и r_{12} — межэлектронное расстояние. Получим следующее уравнение в новых переменных R, α и θ:

$$\Big[\frac{1}{R^5}\frac{\partial}{\partial R}R^5\frac{\partial}{\partial R}+\frac{1}{R^2}\frac{1}{\sin^2\alpha\cos^2\alpha}\frac{\partial}{\partial\alpha}\sin^2\alpha\cos^2\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}$$

$$+\frac{1}{R^2\sin^2\alpha\cos^2\alpha}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{2Z(\sin\alpha+\cos\alpha)}{R\sin\alpha\cos\alpha}$$

$$-\frac{2\lambda}{R\sqrt{1-\sin 2\alpha\cos\theta}}+2E\Big]f^{+}_{00}=0. \qquad (4)$$

Иерархия новых переменных такова: θ — наиболее быстрая, α — менее быстрая и R — наиболее медленная переменная. Нас интересуют решения в окрестности $\theta=\pi$, $\alpha=\frac{\pi}{4}$.

Спектр χ, в котором $m=0,1,2\ldots$, записывается в виде

$$\chi=\frac{4\sqrt{2}Z}{R}-\frac{\sqrt{2}\lambda}{R}+\frac{\sqrt{\lambda}}{2\sqrt{R^3}}\big(4n-2-\sqrt{3}\big)+\frac{4}{R^2}$$

$$-\frac{(2m+1)\sqrt{16-6\sqrt{2}ZR+\frac{\sqrt{2}}{2}\lambda R+\frac{\sqrt{\lambda R}}{4}(4n-2-\sqrt{3})}}{R^2}, \qquad (5)$$

где n — квантовое число, полученное из уравнения по θ.

Значения энергии для S-состояния

m	n	k	$-E_0$	Ссылки
1	1	2	0.763	0.766 [8], [10], [11]
		3	0.431	
		4	0.272	
1	0	2	0.778	0.778 [8], [10], [11]
		3	0.439	
		4	0.278	
2	0	3	0.141	0.138 [9]
		4	0.119	
		5	0.102	
3	0	3	0.139	0.138 [9]
		4	0.109	
		5	0.085	
4	0	4	0.082	0.079 [12]
		5	0.055	0.051 [12]
5	0	4	0.068	0.069 [12]
		5	0.052	0.051 [12]

Отметим, что четные m соответствуют синглетным состояниям, а нечетные — триплетным.

Классический импульс рассматриваемой системы

$$p = \sqrt{2E + \chi}. \tag{6}$$

Применяя условия квантования Бора–Зоммерфельда:

$$\int\limits_{R_1}^{R_2} dR\sqrt{\chi + 2E} = \pi(2k+1), \qquad k = 0, 1, 2\ldots, \tag{7}$$

где R_1 и R_2 — точки поворота.

Полученные значения энергии E_0 для случая S-состояния приведены в таблице.

Как видно из таблицы, большинство значений энергий находится в хорошем согласии с данными работ [8–12].

Список литературы

[1] *Фок В.А.* // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1954. Т. 18. № 1. С. 2–15.
[2] *Herrick D.K., Kellman M.E.* // Phys. Rev. A. 1980. V. 21. N 2. P. 418–425.
[3] *Herrick D.H., Sinanoglu O.* // Phys. Rev. A. 1975. V. 97. N 1. P. 97–102.
[4] *Breit G.* // Phys. Rev. 1930. V. 35. N 6. P. 569–578.
[5] *Ezra G.S., Berry R.S.* // Phys. Rev. A. 1982. V. 25. N 3. P. 1513–1527.
[6] *Nikitin S.I., Ostrovsky V.N.* // J. Phys. B. 1985. V. 18. N 22. P. 4349–4369.
[7] *Lin C.D.* // Phys. Rev. A. 1982. V. 76. N 1. P. 76–87.
[8] *Chen M.K.* // Phys. Rev. A. 1997. V. 56. N 6. P. 4537–4544.
[9] *Ho Y.K.* // Phys. Rev. A. 1997. V. 56. N 5. P. 3634–3637.
[10] *Ho Y.K.* // Phys. Rev. A. 1986. V. 34. N 5. P. 4402–4404.
[11] *Lindroth J.E.* // Phys. Rev. A. 1994. V. 49. N 6. P. 4473–4480.
[12] *Ho Y.K.* // J. Phys. B. 1990. V. 23. N 6. P. L71–L79.