

УДК 539.184.01

ОБ ОДНОМ ДОПОЛНИТЕЛЬНОМ ВЫРОЖДЕНИИ ДЛЯ АТОМА ГЕЛИЯ

Фролов А. М.

Исследованы синглет-триплетное вырождение для соответствующих энергетических уровней гелиоподобных (двухэлектронных) атомов и ионов с высокими значениями L и структура подобных (ридберговских) состояний. Показано, что дополнительное вырождение уровней энергии в этих системах связано с выбыванием межэлектронной (хиллераасовской) координаты r_{12} в волновой функции по мере увеличения L . Из результатов работы следует весьма простая структура спектра атома гелия и гелиоподобных ионов в случае состояний с высокими значениями L .

Опыт высокоточных вариационных расчетов S , P и D связанных состояний атома гелия [1] позволяет объяснить «дополнительное» вырождение соответствующих синглетных и триплетных состояний с высокими L . Выводы, сделанные в работе, позволяют упростить прецизионные вычисления ридберговских связанных состояний.

Вариационное разложение для волновой функции трехчастичной гелиоподобной системы имеет вид [2]

$$\psi_{L0} = \sum_{i=1}^N \sum_{l=0}^L c_{il} Y_{L0}^{l, L-l}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \exp(-\alpha_1^{(i)} r_1 - \alpha_2^{(i)} r_2 - \alpha_3^{(i)} r_{12}), \quad (1)$$

где традиционно [2]

$$Y_{L0}^{l_1 l_2}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = a_{l_1 l_2} x^{l_1} y^{l_2} \sum_m C_{l_1 m, l_2 - m}^{L0} Y_{l_1 m_1}(\mathbf{n}_x) Y_{l_2 m_2}(\mathbf{n}_y). \quad (2)$$

В (2) константы $a_{l_1 l_2}$ используются для упрощения формул [1]. Нелинейные параметры $\alpha_j^{(i)}$ выбираются квазислучайным образом из положительных интервалов $[0, A_j]$ ($j=1, 2, 3$) [1, 2]. В этой работе положительность интервалов обеспечивает положительность используемых $\alpha_j^{(i)}$. Три конечные точки A_j ($j=1, 2, 3$) являются реальными нелинейными параметрами метода в отличие от $\alpha_j^{(i)}$, выбираемых априорно (до расчета) и без оптимизации. Линейные параметры c_{il} в (1) определяются при решении задачи на собственные значения.

Результаты вариационных расчетов S -, P - и D -состояний (основных) атома гелия представлены в табл. 1. Энергии для S - и P -состояний по стабильности значащих цифр при промежуточных размерностях являются одними из наиболее точных значений, приводимых в литературе для атома ${}^\infty\text{He}$. D -состояния ранее не рассчитывались, так как при использовании межэлектронной координаты r_{12} для гелиоподобных систем в вариационных разложениях (хиллераасовском, экспоненциальном) при $L > 1$ возникали непреодолимые трудности. Обобщая метод [3] и модифицировав его [2, 1], в настоящей работе удалось преодолеть эту трудность и рассчитать связанные D -состояния атома ${}^\infty\text{He}$, а также вычислить изотопические смещения в ${}^3\text{D}$ - и ${}^3\text{D}$ -состояниях атома гелия.

Из табл. 1 видно, что по мере роста L ($S \rightarrow P \rightarrow D$) разности энергий синглетных и триплетных основных состояний быстро стремятся к нулю. Это известно из спектроскопических наблюдений (см., например, [4-6]). В табл. 2

Таблица 1
Энергии состояний атома ∞ He (в ат. ед.)

N_i	1'S	2'S	2P	2P	3D	3D
150	-2.903724374135	-2.475229377272	-2.42384306385	-2.433164162720	-2.055612265	-2.055613436
175	-2.903724375435	-2.475229377858	-2.42384307734	-2.433164178964	—	—
200	-2.903724376006	-2.475229378160	-2.42384308202	-2.433164185925	—	—
225	-2.903724376119	-2.475229378187	-2.42384308371	-2.433164187089	—	—
250	—	—	-2.42384308498	-2.433164188054	-2.055612265	-2.055613436
300	—	—	—	—	-2.055624349	-2.055623582
350	—	—	—	—	-2.055629022	-2.055629037
∞	-2.9037243768	-2.47522937820	-2.423843087	-2.43316418710	-2.055635550	-2.055636643

приведены оптимизированные концы интервалов A_1, A_2, A_3 , из которых в (1) были выбраны (квазислучайно [7]) соответственно $\alpha_{1l}^{(i)}$, $\alpha_{2l}^{(i)}$, $\alpha_{3l}^{(i)}$. Из табл. 2 следует, что при увеличении полного значения L интервал $[0, A_3]$, из которого выбираются значения $\alpha_{3l}^{(i)}$, стягивается в точку $[0, 0]$, поэтому выбираемые по $[0, A_3]$ значения $\alpha_{3l}^{(i)}$, также стремятся к нулю (по мере роста L). Стремление к нулю «сопряженной переменной» $\alpha_3^{(i)}$ означает, что переменная r_{12} принимает, наоборот, очень большие значения. Физически это соответствует тому, что в состояниях гелиоподобных систем с высокими L один из электронов, например второй, находится на значительно большем расстоянии от ядра, чем первый. Отсюда следует, что с высокой точностью для таких состояний $r_{12} = r_2$, и соответствующее вариационное разложение есть

$$\psi_{L0} = \sum_{i=1}^N \sum_{l=0}^L c_{il} Y_{l0}^{i, L-l}(r_1, r_2) \exp(-\alpha_{1l}^{(i)} r_1 - \alpha_{2l}^{(i)} r_2). \quad (3)$$

Все обозначения в (3) те же, что и в (1).

Таким образом, использование межэлектронной (хиллераасовской) координаты r_{12} в вариационных расчетах имеет смысл только для небольших значений L (S -, P - и отчасти D -состояния). Для более высоких L использование этой координаты уже не является необходимым даже при условии сохранения очень высокой точности расчетов. Это очень важно для практических применений, так как трудности в расчетах с использованием хиллераасовской координаты r_{12} стремительно возрастают при увеличении L . Следует отметить приблизительную одинаковость A_1 и A_2 , представленных в табл. 2, соответствующую тому, что переменные $\alpha_{1l}^{(i)}$ и $\alpha_{2l}^{(i)}$ принудительно симметризируются (либо антисимметризируются), чтобы для вариационного разложения (1) или (3) выполнялся принцип Паули, поэтому примерное равенство A_1 и A_2 , например для D -состояний, не позволяет опровергнуть кластерную структуру этих состояний.

У факта «выбывания» межэлектронной r_{12} координаты с увеличением значения полного момента L существует целый ряд ценных физических следствий. Разложение (3) соответствует (в отличие от (1)) движению двух независимых электронов. Таким образом, с ростом L высокоточные (хиллераасовские и экспоненциальные) разложения «плавно» переходят в разложения модели независимых электронов, которая тем успешнее применима к расчету связанных состояний, чем выше L . В этой модели связанному состоянию с высоким L однозначно

Таблица 2

Оптимизированные значения констант A_1, A_2, A_3 , использованные в расчетах

Состояние	A_1	A_2	A_3
1^1S	3.01	3.15	2.7648
2^3S	2.43	2.43	1.05
2^1P	2.513	2.513	0.2
2^3P	2.42	2.42	0.2
3^1D	2.	2.153	0.0958
3^3D	2.	2.153	0.0958

соответствует конфигурация $1S(L+1)l$, где $l=L$, т. е. один из электронов обязательно находится в основном состоянии [6, 7]. Для подобных конфигураций обменное взаимодействие (из-за ортогональности единицы и $Y_{lm}(\mathbf{n})$) с высокой точностью (так как $l=L$ очень велико) равно нулю, что и приводит к наблюдаемому в табл. 1 синглет-триплетному вырождению D -состояний. Чем выше будет L , тем более строго будут вырождены синглетные и триплетные уровни с одинаковыми квантовыми числами. Это замечательное обстоятельство также следует использовать в практике расчетов состояний гелиоподобных систем с высокими L , так как при этом электроны можно рассматривать либо как фермионы, либо как бозоны, либо как различимые частицы, т. е. без антисимметризации по спину и координатам, что при высоких L выполнить уже не столь тривиально.

Для конфигурации $1S(L+1)l$, где $l=L$, можно достаточно просто оценить не только обменное электрон-электронное взаимодействие, но и прямое (кулоновское). Следуя методу Гейзенберга, описанному в [6], сумма кулоновского электрон-электронного взаимодействия и взаимодействия более далекого электрона с экранированным ядром (т. е. с зарядом на единицу меньшим) оценивается для рассматриваемых конфигураций следующим образом:

$$J(L) = \frac{2}{(2L+1)^{2L+3}} \left[1 + \frac{1}{L+1} - \frac{1}{2(L+1)^2} \right]. \quad (4)$$

Очевидно, что по мере роста L очень быстро $J(L) \rightarrow 0$; поэтому энергии основных состояний с высокими значениями L должны с высокой точностью следовать формуле (случай ${}^\infty\text{He}$)

$$\varepsilon(L) = -2 - \frac{0.5}{(L+1)^2}. \quad (5)$$

Аналогичное рассмотрение вполне применимо и к возбужденным состояниям с высокими L , для энергий которых получается очевидная формула

$$\varepsilon(L, n) = -2 - \frac{0.5}{(L+n+1)^2}, \quad (6)$$

где n — индекс возбужденного состояния в серии с данным L (радиальное квантовое число). Чем выше L , тем точнее уровни энергии должны следовать (5) или (6), а разности между соответствующими синглетными и триплетными энергиями будут исчезающе малыми. Согласно (5), для D -состояний (основных) $\varepsilon(2) = -2.05555$ а. е., тогда как в табл. 1 имеет значение -2.055635 а. е., разность между ними $\Delta \approx 8 \cdot 10^{-5}$ а. е. Для более высоких L значение стремительно уменьшается (для F -состояний $\Delta \approx 2 \cdot 10^{-7}$ а. е.).

Из проведенного рассмотрения следует весьма простая структура спектра состояний атома He (и гелиоподобных — двухэлектронных систем), соответствующих высоким значениям L ($L \geq 3$). Имеет место очень точное синглет-триплетное вырождение соответствующих уровней, а сам спектр таких состояний полностью водородоподобен. Как следствие этого, можно достаточно просто описать все энергетические уровни атома гелия с высокими L в виде единого мультиплета группы $O(4, 2)$ [8]. При этом, очевидно, индекс базисного вектора представления l должен удовлетворять условию: $l \geq \tilde{L}$, где \tilde{L} — пороговое значение, отделяющее высокие и малые L . Тем самым с очень высокой

точностью волновые функции состояний с высокими L будут произведениями четырехмерных шаровых функций аналогично случаю атома водорода [9], что следует использовать для построения функций Грина и других (аналогично [10]) в тех задачах, где требуется знать спектр «в целом». В настоящей работе следствия дополнительной симметрии и водородоподобности состояний атома гелия с высокими значениями L обсуждаться не будут.

Таблица 3
Изотопические сдвиги и элементарные поправки на конечную массу ядра
(в ат. ед. $\times 10^{-4}$)

Состояние	${}^4\text{He}$ ($M = 7294.2618241 m_e$), изотопический сдвиг/элементарная поправка	${}^3\text{He}$ ($M = 3486.8785 m_e$), изотопический сдвиг/элементарная поправка
1^1S	4.19821	3.57867
	3.98083	3.28596
2^3S	2.99188	3.97073
	2.98211	3.95793
2^1P	2.97432	3.94742
	2.91166	3.86443
2^3P	2.83550	3.76317
	2.92444	3.8814
3^1D	2.8171	3.7388
	2.8181	3.7400
3^3D	2.8170	3.7388
	2.8181	3.7403

В табл. 3 приводятся значения изотопических смещений, рассчитанных для различных состояний (S , P и D) атомов ${}^3\text{He}$ и ${}^4\text{He}$ по отношению к ${}^4\text{He}$. Результаты табл. 3 хорошо подтверждают основные выводы [6] о слагаемых изотопических сдвигов. Во-первых, для D -состояний изотопический сдвиг имеет с высокой точностью элементарный характер [6], т. е. значения полных энергий для ${}^3\text{He}$ и ${}^4\text{He}$ можно получить из соответствующих энергий для ${}^4\text{He}$ в атомных единицах простым пересчетом на конечную массу ядра (M)

$$E({}^M\text{He}) = E(\infty) (1 + M^{-1})^{-1}. \quad (7)$$

Во-вторых, в случае 2^1P -состояния изотопический сдвиг превосходит элементарную поправку, а в случае 2^3P наоборот, чему соответствует движение электронов в парасостояниях ($S=0$) преимущественно в одну сторону, а в ортосостояниях ($S=1$) чаще в противоположных [6]. В целом необходимо выполнить более тщательное исследование зависимости изотопического сдвига и его слагаемых от типа рассматриваемого состояния, так как экспоненциальное вариационное разложение (1) обеспечивает получение высокоточных волновых функций в случае любого состояния гелиоподобной системы.

Автор благодарит Ю. Н. Демкова за ценные замечания, которые были учтены в настоящей работе.

Литература

- [1] Фролов А. М. — Препринт № 4274. М., ИАЭ, 1986; Ядерная физика, 1985, т. 42, с. 37—41.
- [2] Фролов А. М., Эфрос В. Д. — Письма в ЖЭТФ, 1984, т. 39, с. 449.
- [3] Thakkar A. J., Smith V. H. — Phys. Rev., 1977, v. A15, p. 1, 16.
- [4] Стриганов А. Р., Светлицкий Н. С. Таблицы спектральных линий нейтральных и ионизованных атомов. М., 1966.
- [5] Таблицы физических величин: Справочник / Под ред. И. К. Киконова. М., 1976, гл. 32.
- [6] Бете Г., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М., 1960.
- [7] Бете Г. Квантовая механика. М., 1965.
- [8] Малкин И. А., Манько В. И. — Письма в ЖЭТФ, 1965, т. 2, с. 230.
- [9] Schwinger J. — J. Math. Phys., 1964, v. 5, p. 1606.
- [10] Hostler L. — J. Math. Phys., 1964, v. 5, p. 591.

Поступило в Редакцию 9 апреля 1986 г.