

АТОМНАЯ И ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

УДК 539.141

ОБ ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ ДВУМЕРНЫХ ДВУХЭЛЕКТРОННЫХ АТОМНЫХ СИСТЕМ

В. В. Комаров, А. М. Попова, В. Г. Айрапетян, А. М. Гаджиев

(НИИЯФ)

Исследуются спектральные свойства оператора Шрёдингера двумерных двухэлектронных атомных систем. Получены оценки Тирринга для энергии основного состояния. Рассчитаны значения энергии основного состояния в первом и третьем приближениях.

1. В настоящей работе мы рассматриваем двумерные двухэлектронные атомные системы (H^- , He, Li^+ и т. д.), описываемые гамильтонианом (в атомных единицах)

$$H = H_0 + V = h_1 + h_2 + V; \quad h_i = -\frac{1}{2} \Delta_i - \frac{Z}{r_i}; \quad V = \frac{1}{r_{12}}; \quad i = 1, 2, \quad (1)$$

где $r_i \in R^2$ — радиус-векторы электронов относительно ядра ($i=1, 2$), $r_{12} = |r_2 - r_1|$; $Z = 1, 2, 3, \dots$; лапласианы Δ_1 и Δ_2 действуют в R^2 по координатам электронов. Гамильтониан (1) записан в приближении бесконечной массы ядра и без учета релятивистских эффектов.

Оператор $h = (-1/2)\Delta - Z/r$, заданный на $L^2(R^2)$, соответствует оператору энергии двумерной одноэлектронной атомной системы с зарядом ядра Z . Соответственно оператор H_0 , заданный на $L^2(R^4)$, можно представить в виде $H_0 = I \otimes h + h \otimes I$. Поскольку h и H_0 самосопряжены, то при естественном отождествлении пространства $L^2(R^4)$ с пространством $L^2(R^2) \otimes L^2(R^2)$ спектр H_0 можно выразить через спектр h [1]. Собственные значения h известны [2, 3]:

$$E_n = \left\{ -\frac{Z^2}{2(n+1/2)^2} \right\}_{n=0}^{\infty}.$$

Следовательно, оператор H_0 имеет собственные значения

$$E_{n,m} = \left\{ -\frac{1}{2} \frac{Z^2}{(n+1/2)^2} - \frac{1}{2} \frac{Z^2}{(m+1/2)^2} \right\}_{n,m=0}^{\infty}$$

Непрерывный спектр оператора h начинается в точке $E=0$: $\sigma_{\text{ess}}(h) = [0, \infty)$. Соответственно $\sigma_{\text{ess}}(H_0) = [-2Z^2, \infty)$. Таким образом, спектр оператора H_0 имеет следующую структуру:

$$\sigma(H_0) = \sigma_{\text{disc}}(H_0) \cup \sigma_{\text{ess}}(H_0) = \left\{ -2Z^2 - \frac{Z^2}{2(n+1/2)^2} \right\}_{n=0}^{\infty} \cup [-2Z^2, \infty). \quad (2)$$

Как видно из (2), если $n \geq 2$ и $m \geq 2$, то собственные значения $E_{n,m}$ лежат в непрерывном спектре. Возникает общий вопрос о поведении $\sigma(H_0)$ при включении взаимодействия V между электронами. В настоящей работе мы ограничимся лишь одним аспектом этого обширного вопроса, а именно оценкой энергии основного состояния E гамильтониана H .

2. В этом разделе мы получим нижние и верхние оценки для энергии основного состояния операторов (1). Для этого мы будем пользоваться методом Тирринга, являющимся наиболее простым и точным и содержащим как специальный случай следующую оценку [4]: если основное состояние Ψ_0 с энергией E_0 оператора H_0 дискретно и невырождено, то энергия E основного состояния оператора $H_0 + V$, $V \geq 0$, удовлетворяет оценке

$$\langle \Psi_0 | V^{-1} | \Psi_0 \rangle^{-1} \leq E - E_0 \leq \langle \Psi_0 | V | \Psi_0 \rangle. \quad (3)$$

В рассматриваемом нами случае основное состояние оператора H_0 дискретно, невырождено и имеет энергию (2)

$$E_0 = -4Z^2. \quad (4)$$

Кроме того, потенциал взаимодействия электронов $V = 1/r_{12}$ положительно определен. Значит, оценка (3) применима в условиях нашей задачи.

Структура оператора H_0 такова, что волновая функция Ψ_0 его основного состояния есть произведение волновых функций основного состояния операторов h_1 и h_2 , явный вид которых известен [2, 3]. В полярных координатах нормированная на единицу волновая функция Ψ_0 имеет вид

$$\Psi_0(r_1, r_2) = \frac{(4Z)^2}{2\pi} \exp(-2Zr_1) \exp(-2Zr_2). \quad (5)$$

Непосредственное вычисление матричных элементов операторов $V = 1/r_{12}$ и $V^{-1} = r_{12}$ с помощью волновых функций (5) дает следующие результаты:

$$\langle \Psi_0 | V | \Psi_0 \rangle = \frac{3\pi}{4} Z; \quad \langle \Psi_0 | V^{-1} | \Psi_0 \rangle = \frac{330\pi - 256}{1024Z}. \quad (6)$$

Подставляя (6) и (4) в (3), окончательно получим оценки Тирринга для энергии основного состояния оператора (1):

$$-4Z^2 + \frac{1024}{330\pi - 256} Z \leq E \leq -4Z^2 + \frac{3\pi}{4} Z. \quad (7)$$

3. Для расчета энергии основного состояния изучаемой системы в первом приближении будем пользоваться следующим известным методом: аппроксимируем волновую функцию основного состояния возмущенной системы в виде произведения двух водородных функций основного состояния с некоторым эффективным зарядом ядра, а затем минимизируем матричный элемент гамильтониана по функциям эффективного заряда. Простые вычисления приводят к результату

$$E^{(1)} = -4(Z - 3\pi/32)^2. \quad (8)$$

Высшие приближения можно получить, если для волновой функции вместо простого произведения водородных функций взять некоторое общее выражение с несколькими вариационными параметрами, которое соответствовало бы сущности данной проблемы. Мы воспользуемся с этой целью методом Хиллерааса [5], представляющим собой фактически комбинацию метода Рэля—Ритца [4] и метода масштабных преобразований [6]. Техническими особенностями этого метода являются: во-первых, переход к параметрическим координатам

$$s = r_1 + r_2, \quad t = r_2 - r_1, \quad u = r_{12}, \quad (9)$$

во-вторых, выбор волновой функции основного состояния в виде

$$\Psi = \exp(-ks/2) \cdot F(ks, kt, ku), \quad (10)$$

где k — параметр масштабного преобразования; $F(ks, kt, ku)$ — полином от s, t, u , который в силу симметрии волновой функции относительно перестановки электронов должен содержать только четные степени t . Параметр k и коэффициенты при слагаемых в полиноме F являются вариационными.

Опуская утомительные вычисления, мы сразу приводим в сводной таблице результат вариационного расчета энергии основного состояния в третьем приближении, проведенного с помощью ЭВМ.

Местоположение непрерывного спектра и энергия основного состояния двумерных двухэлектронных атомных систем (в атомных единицах)

Z	Непрерывный спектр $\sigma_{\text{ess}}(H_0) = [-2Z^2, \infty)$	Оценки Тирринга	Первое приближение, $E^{(1)}$	Третье приближение, $E^{(3)}$
1	$[-2, \infty)$	$-2,6884 < E < -1,6438$	$-1,9908$	$-2,0756$
2	$[-8, \infty)$	$-13,3768 < E < -11,2876$	$-11,6346$	$-11,3025$
3	$[-18, \infty)$	$-32,0652 < E < -28,9314$	$-29,2784$	$-29,8359$
4	$[-32, \infty)$	$-58,7536 < E < -54,5752$	$-54,4222$	$-55,9577$

Как видно из таблицы, при $Z=1$ (отрицательный ион водорода), как и в трехмерном случае [5], $E^{(1)}$ оказывается в непрерывном спектре. Поэтому поиск более точного значения E становится принципиальным и уже третье приближение $E^{(3)}$ лежит ниже точки начала непрерывного спектра.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 1. Функциональный анализ. М., 1977. [2] Zaslav B., Zandler M. E.//Amer. J. Phys. 1967. 35, N 12. P. 1118. [3] Мардоян Л. Г., Погосян Г. С., Сисякян А. Н., Тер-Антонян В. М.//ТМФ. 1984. 61, № 1. С. 99. [4] Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 4. Анализ операторов. М., 1982. [5] Hylleraas E.//Zeitschr. für Phys. 1928. 48. P. 469; Hylleraas E.//Ibid. 1930. 65. P. 209. [6] Kohn W.//Phys. Rev. 1947. 71, N 9. P. 635.

Поступила в редакцию
20.04.88