

УДК 539.182

ДВУХЧАСТИЧНАЯ КВАНТОВАЯ СИСТЕМА: ПРИБЛИЖЕНИЕ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ И МЕЖЧАСТИЧНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ

Д. В. Куаковкий, А. М. Попов

(НИИЯФ)

На примере модельной двухчастичной системы исследуется точность определения энергетического спектра и волновых функций стационарных состояний в рамках приближения самосогласованного поля Хартри–Фока. Обсуждается возможность использования этого приближения для описания межчастичных корреляций.

Исследование структуры квантовой системы и ее временной эволюции на основе уравнения Шрёдингера является центральной задачей атомной физики и физики атомного ядра [1, 2]. Хотя реальные системы, как правило, многочастичны (многоэлектронный атом, атомное ядро, электронная подсистема молекулы или твердого тела), их теоретический анализ обычно проводится в одночастичном приближении путем введения одночастичной волновой функции объектов, образующих квантовую систему, в рамках концепции самосогласованного поля. Такой подход для описания строения многочастичных атомов, предложенный Д. Хартри и позднее модифицированный В. Фоком, носит название метода Хартри–Фока [3]. В физике атомного ядра аналогичный подход реализуется в рамках одночастичной оболочечной модели [2]. Однако, несмотря на достигнутые успехи в описании энергетических спектров многоэлектронных атомов в рамках приближения самосогласованного поля, вопрос о точности получаемых таким образом результатов в ряде случаев остается открытым [4, 5]. Более того, последние данные по динамике ионизации многоэлектронных атомов в сильных электромагнитных полях показывают, что расчеты в рамках нестационарных уравнений Хартри–Фока не описывают процесс двухэлектронной ионизации даже на качественном уровне [6].

В настоящей работе на примере модельной одномерной двухчастичной системы исследуется точность расчетов структуры стационарных состояний, выполненных в приближении Хартри–Фока, в зависимости от величины межчастичного взаимодействия. Исследуется степень коррелированности системы и возможность ее описания в рамках метода самосогласованного поля.

Рассмотрим систему двух связанных осцилляторов, описываемую гамильтонианом

$$H = H_1(x) + H_2(y) + V_{12}(x - y) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2) + \frac{\alpha}{2}(x - y)^2.$$

Предполагается, что осцилляторы одинаковые. Переходя к новым координатам: $\eta = x - y$ (координата относительного движения), $\xi = (x + y)/2$ (координата

та движения центра масс), получим систему из двух независимых осцилляторов. Общее решение задачи на собственные значения записывается в виде [3]

$$E_{nk} = \hbar\Omega_1 \left(\frac{1}{2} + n \right) + \hbar\Omega_2 \left(\frac{1}{2} + k \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \left[1 + 2n + (1 + 2k)\sqrt{1 + 2\zeta} \right], \quad (1)$$

$$\Phi_{nk}(\eta, \xi) = N_n N_k H_n \left(\frac{\xi}{a_1} \right) H_k \left(\frac{\eta}{a_2} \right) \times \exp \left\{ -\frac{\xi^2}{2a_1^2} - \frac{\eta^2}{2a_2^2} \right\}, \quad k, n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2)$$

где $\zeta = \alpha/(m\omega^2)$ — безразмерный параметр межчастичного взаимодействия; $a_1^2 = \hbar/(M\Omega_1)$; $a_2^2 = \hbar/(\mu\Omega_2)$; $M = 2m$; $\mu = m/2$ — приведенная масса; $\Omega_1 = \omega$ и $\Omega_2 = \omega\sqrt{1 + 2\zeta}$ — частоты, соответствующие движению центра масс и относительно движению; $N_n^2 = 1/(2^n n! \sqrt{\pi})$ — нормировочный множитель; $H_n(x)$ — полином Эрмита.

Для определенности будем считать, что наши объекты — фермионы, т.е. полная волновая функция антисимметрична относительно перестановки частиц местами. Следовательно, симметричные относительно перестановки частиц состояния, описываемые пространственной волновой функцией $\Phi_{kn}(x, y)$ (k — любые, $n = 0, 2, 4, \dots$), являются синглетными, а антисимметричные ($n = 1, 3, 5, \dots$) — триплетными. В частности, основное состояние $\Phi_{00}(x, y)$ — синглет, характеризующийся функцией

$$\Phi_{00}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_1 a_2}} \times \exp \left[-\frac{m\omega}{4\hbar} \left(1 + \sqrt{1 + 2\zeta} \right) (x^2 + y^2) - \frac{m\omega}{2\hbar} \left(1 - \sqrt{1 + 2\zeta} \right) xy \right], \quad (3)$$

причем $\frac{1}{\sqrt{\pi a_1 a_2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi m \omega \sqrt{1 + 2\zeta}}}$.

Рассмотрим случай $\zeta \ll 1$. Тогда, воспользовавшись теорией возмущения, можем записать:

$$\Phi_{00} = \frac{1}{\sqrt{\pi} a} \exp \left\{ -\frac{x^2 + y^2}{2a^2} \right\} \times \left(1 - \frac{\alpha}{2\hbar\omega} (x - y)^2 + \frac{\alpha a^2}{2\hbar\omega} \right), \quad a^2 = \frac{\hbar}{m\omega},$$

что полностью совпадает с решением, полученным из (3) при разложении в ряд со степенью точности $o(\alpha^2)$.

Перейдем теперь к анализу системы в рамках приближения самосогласованного поля. В этом случае волновая функция системы представима в виде симметричной (для синглетов) или антисимметричной (для триплетов) комбинации одночастичных орбиталей:

$$\Phi_{kn}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_k(x)\varphi_n(y) \pm \varphi_k(y)\varphi_n(x)]. \quad (4)$$

В случае если параметр межчастичного взаимодействия $\zeta = 0$, эти орбитали определяются решениями стационарного уравнения Шрёдингера с гамильтонианом $H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. При этом функции (4) и (2) тождественны.

В общем случае система уравнений Хартри–Фока записывается в виде

$$\left[H_1(x) + \int \varphi_k^*(y) V_{12} \varphi_k(y) dy - E_n \right] \varphi_n(x) \pm \varphi_k(x) \int \varphi_n^*(y) V_{12} \varphi_k(y) dy = 0, \quad (5)$$

$$\left[H_2(y) + \int \varphi_n^*(x) V_{12} \varphi_n(x) dx - E_k \right] \varphi_k(y) \pm \varphi_n(y) \int \varphi_k^*(x) V_{12} \varphi_n(x) dx = 0.$$

Решение данной системы уравнений можно найти в базе функций, удовлетворяющих уравнениям Хартри (эти уравнения отличаются от (5) отсутствием в левой части обменного члена): $\varphi_n = |n\rangle$, $\varphi_k = |k\rangle$, где $|n\rangle$, $|k\rangle$ — хартриевские функции: $|n\rangle = N_n H_n(x/a') \exp\{-x^2/2a'^2\}$, $|k\rangle = N_k H_k(y/a') \exp\{-y^2/2a'^2\}$. Здесь $a'^2 = \hbar/(m\omega\sqrt{1+\zeta})$.

Как видно из (5), в приближении самосогласованного поля потенциал, в котором движется каждая из частиц, остается гармоническим, но частота колебаний изменяется и становится равной $\omega\sqrt{1+\zeta}$. Что касается обменного члена в уравнениях (5), то он оказывается отличным от нуля, только если квантовые числа состояний, в которых находятся частицы, удовлетворяют соотношениям $k = n \pm 1$, $k = n \pm 2$.

Энергетический спектр в приближении Хартри–Фока (мы ограничимся случаем одночастичных возбуждений) определяется выражениями

$$E_{0n}^s = E_{0n}^t = (n+1)\hbar\omega\sqrt{1+\zeta}, \quad n = 3, 4, 5, \dots,$$

$$E_{01}^{s(t)} = 2\hbar\omega \left(\sqrt{1+\zeta} \mp \frac{\zeta}{4\sqrt{1+\zeta}} \right),$$

$$E_{02}^{s(t)} = 3\hbar\omega \left(\sqrt{1+\zeta} \mp \frac{\zeta}{3\sqrt{1+\zeta}} \right).$$

Здесь $E_{0n}^{s(t)}$ — уровень энергии синглетного (триплетного) состояния $|0, n\rangle$. Основное состояние является синглетом с энергией

$$E_{00} = \hbar\omega\sqrt{1+\zeta}.$$

На рис. 1 приведена зависимость рассчитанной энергии основного состояния системы от параметра межчастичного взаимодействия ζ . В случае $|\zeta| \leq 0,3$ хартри-фоковский расчет и расчет по теории возмущений совпадает с точным значением энергии (см. выражение (1)) в пределах 5%. При увеличении значения параметра ζ отличие возрастает, однако метод Хартри–Фока оказывается лучшим приближением к точному решению, чем первый порядок теории возмущений. Наиболее существенным оказывается различие решений в области $\zeta \cong -0,5$. При $\zeta \leq -0,5$ состояний дискретного спектра в системе нет и метод самосогласованного поля даже качественно не описывает систему.

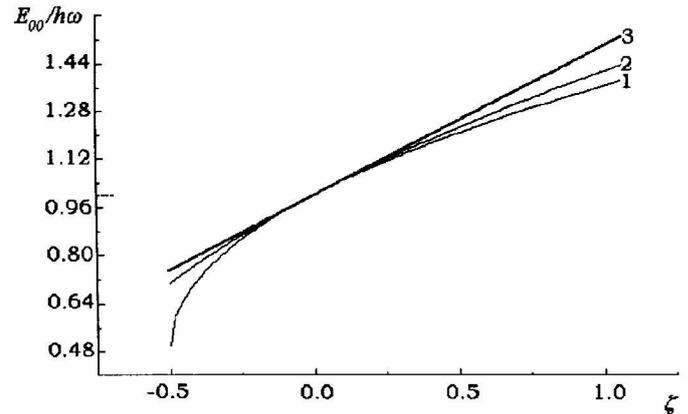


Рис. 1. Зависимость энергии основного состояния рассматриваемой системы от параметра межчастичного взаимодействия $\zeta = \alpha/m\omega^2$: точное решение (1), расчет методом Хартри–Фока (2) и по теории возмущений (3)

Более подробно остановимся на структуре основного и нижних возбужденных состояний. На рис. 2 приведены распределения плотности вероятности $|\Phi_{00}(x, y)|^2$ для основного состояния системы (при значении параметра $\zeta = 0,9$), соответствующие точному решению и рассчитанному в рамках приближения Хартри–Фока. В случае точного решения распределение асимметрично: вследствие взаимного притяжения ($\zeta > 0$) частицы с большей вероятностью располагаются по одну сторону от притягивающего центра. В рамках метода самосогласованного поля подобная межчастичная корреляция отсутствует, поскольку эффективный самосогласованный потенциал, в котором движется каждая из частиц, симметричен. В случае $\zeta < 0$ (отталкивание) частицы

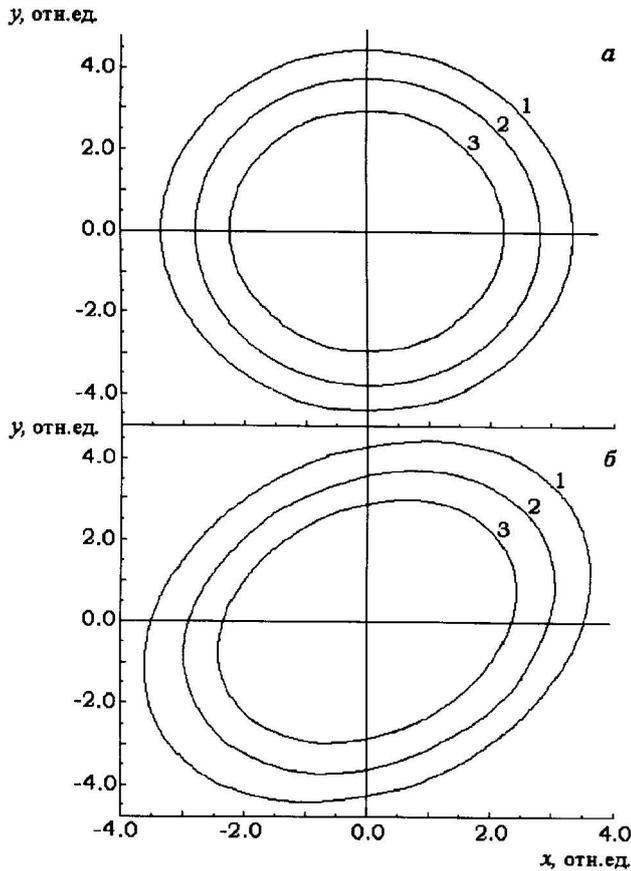


Рис. 2. Пространственное распределение плотности вероятности в основном состоянии $|\Phi_{00}(x, y)|^2$ при значении параметра межчастичного взаимодействия $\zeta = 0,9$: расчет методом Хартри–Фока (а) и точное решение (б). Линии уровня: 0,1 (1), 0,3 (2), 0,45 (3)

с большей вероятностью будут располагаться по разные стороны от центра, однако функция $|\Phi_{00}(x, y)|^2$, рассчитанная в приближении самосогласованного поля, также останется симметричной. Эти утверждения подтверждаются прямым расчетом вероятностей обнаружения частиц по одну (P_1) и по разные (P_2) стороны от притягивающего центра:

$$P_1 = \frac{1}{2} + \frac{\zeta}{1 + 2\zeta}, \quad P_2 = \frac{1}{2} - \frac{\zeta}{1 + 2\zeta}.$$

Аналогичные расчеты с использованием хартри-фовских функций дают $P_1 = P_2 = 1/2$. В результате возникает различие в среднеквадратичном расстоянии между частицами:

$$\langle (x - y)^2 \rangle_{\text{exact}} = \frac{a^2}{\sqrt{1 + 2\zeta}}, \quad \langle (x - y)^2 \rangle_{\text{hart}} = \frac{a^2}{\sqrt{1 + \zeta}}$$

и как следствие в энергии межчастичного взаимодействия. Метод Хартри–Фока занижает эту энергию по сравнению с точным решением.

Аналогичные распределения двухэлектронной плотности вероятности для нижнего триплетного состояния $|0, 1\rangle$ представлены на рис. 3. Эти распределения также свидетельствуют о том, что данное состояние является коррелированным и что эти

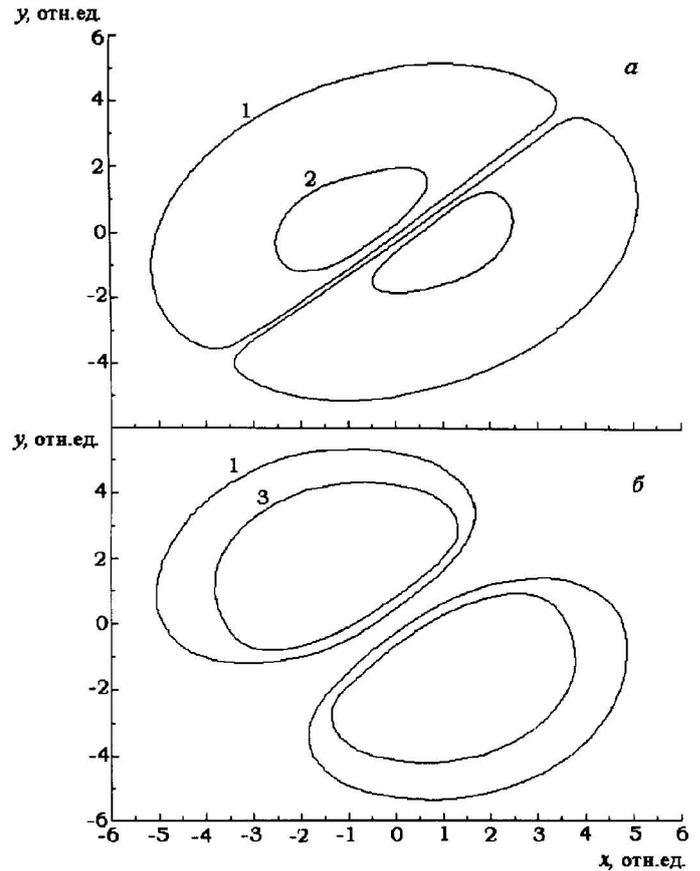


Рис. 3. Пространственное распределение плотности вероятности для системы, находящейся в триплетном состоянии $|0, 1\rangle$, при значении параметра межчастичного взаимодействия $\zeta = 0,9$: точный расчет (а) и расчет методом Хартри–Фока (б). Линии уровня: 0,1 (1) и 0,45 (2)

корреляции не могут быть обнаружены в приближении самосогласованного поля.

Количественно степень коррелированности движения частиц можно охарактеризовать коэффициентом корреляции K [7, 8]:

$$K = [\text{Tr}(\rho^2)]^{-1},$$

где матрица плотности $\rho(x, y)$ определяется как

$$\rho(x, y) = \int \Phi^*(x, t)\Phi(t, y) dt.$$

Отсутствию корреляций соответствует значение $K = 1$. Известно, что в квантовой теории свойства симметрии волновой функции относительно перестановки частиц местами приводят к межчастичным корреляциям даже для невзаимодействующих объектов (парадокс Эйнштейна–Подольского–Розена) [9]. Так, если волновая функция системы в отсутствие взаимодействия между частицами представима в виде (4), причем $k \neq n$, а φ_k и φ_n взаимно ортогональны, то $K = 2$. Для нашего случая, когда присутствует взаимодействие между частицами, коэффициент корреляции оказывается функцией параметра межчастичного взаимодействия. Для основного состояния расчеты с использованием (2) дают

$$K_{00} = \frac{(1 + \sqrt{1 + 2\zeta})^2}{4\sqrt{1 + 2\zeta}},$$

для нижних синглетного и триплетного состояний соответственно находим

$$K_{01}^s = \frac{(1 + \sqrt{1 + 2\zeta})^4}{8(\sqrt{1 + 2\zeta})^3}, \quad K_{01}^t = \frac{(1 + \sqrt{1 + 2\zeta})^4}{8\sqrt{1 + 2\zeta}}. \quad (6)$$

Графики зависимости $K(\zeta)$ для этих трех состояний приведены на рис. 4. Там же приведены и значения коэффициентов корреляции для этих состояний, вычисленные в приближении Хартри–Фока. Нетрудно видеть, что в этом случае $K_{00} = 1$, $K_{01}^s = K_{01}^t = 2$, т. е. наличие взаимодействия не меняет степень коррелированности системы. В частности, в основном состоянии корреляция отсутствует.

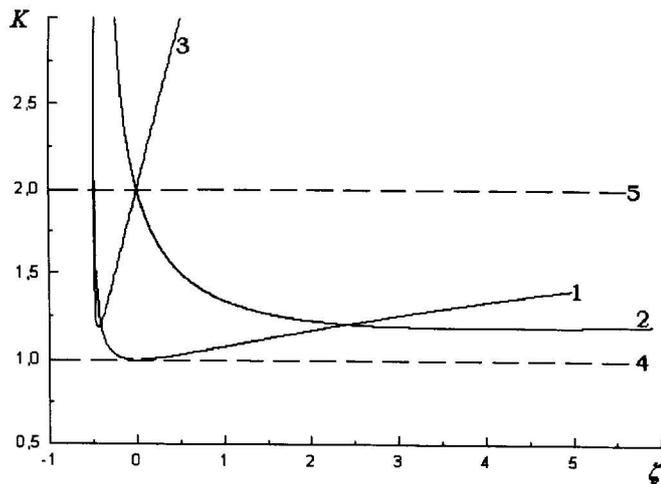


Рис. 4. Зависимость коэффициента корреляции K для различных состояний системы от параметра межчастичного взаимодействия: точный расчет для основного состояния (1), синглета $|0, 1\rangle$ (2) и триплета (3); расчет методом Хартри–Фока для основного состояния (4) и синглета либо триплета $|0, 1\rangle$ (5)

Полученные данные свидетельствуют об ограниченности применения приближения Хартри–Фока для анализа межчастичных корреляций. Метод самосогласованного поля не описывает все тонкости поведения системы, а только учитывает наличие общих свойств симметрии относительно перестановки час-

тиц местами. В частности, интересно отметить, что увеличение параметра межчастичного взаимодействия может приводить к ослаблению межчастичных корреляций. Например, увеличение параметра ζ в интервале от 0 до 3 в случае синглета Φ_{01} приводит к уменьшению коэффициента корреляции от 2 до 1,2.

Таким образом, в данной работе для модельной двухчастичной системы найдено общее решение стационарного уравнения Шрёдингера в рамках приближения самосогласованного поля. Показано, что при расчете энергетического спектра это приближение описывает реальный спектр системы с высокой точностью, если безразмерный параметр межчастичного взаимодействия $|\zeta| \ll 1$. Продемонстрирована ограниченность концепции самосогласованного поля при анализе межчастичных корреляций.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 96-15-96447).

Литература

1. Соболев И.И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977.
2. Бор О., Моттelson Б. Структура атомного ядра. Т. 1. М.: Мир, 1971.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Физматгиз, 1963.
4. Grobe R., Eberly J.H. // Proc. Super-Intense Laser Atom Physics (SILAP 4) / Eds. H.G. Müller, M.V. Fedorov. Kluwer Academic, 1996. P. 221.
5. Pindzola M.S., Gavras P., Gorczyca T.W. // Phys. Rev. 1995. **A51**. P. 3999.
6. Popov A.M., Tikhonova O.V., Volkova E.A. // Laser. Phys., 1999. **9**. P. 124.
7. Grobe R., Rzazewski K., Eberly J.H. // J. Phys. 1994. **B27**. P. L503.
8. Rzazewski K. // Proc. Super-Intense Laser Atom Physics (SILAP 4) / Eds. H.G. Müller, M.V. Fedorov. Kluwer Academic, 1996. P. 213.
9. Бом Д. Квантовая теория. М.: Наука, 1965.

Поступила в редакцию
29.09.99