

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

УДК 539.12

В.В. СКОБЕЛЕВ

К ВОПРОСУ О ВЫЧИСЛЕНИИ ПОСТОЯННОЙ ЭКРАНИРОВАНИЯ И ЭНЕРГИИ ДВУХЭЛЕКТРОННОГО АТОМА

С использованием результатов ранее опубликованной работы автора получены общие выражения для энергии и постоянной экранирования для двухэлектронного атома при произвольных наборах квантовых чисел электронов. В частном случае основного состояния атома из общих формул получается известный классический результат.

Ключевые слова: двухэлектронный атом, любые наборы квантовых чисел, энергия, постоянная экранирования.

Введение

Наиболее эффективным приемом решения квантово-механического аналога классической задачи трех тел – вычисление значения энергии двухэлектронного атома – является вариационный метод Хиллерааса [1, 2] и его различные модификации, включая увеличение числа варьируемых параметров [3].

Применение этого метода к расчету энергии и постоянной экранирования для основного состояния атома гелия с электронами в состояниях $\{n=1, l=0, m=0\}$, $\{n'=1, l'=0, m'=0\}$ дает согласующийся с экспериментом результат (см., например, [4, 5]).

Представляет интерес распространение этого метода и на произвольные состояния электронов в общем случае двухэлектронного атома с любым Z (He, Li⁺ и т.д.), включающих, как частный случай, рассмотренное ранее основное состояние атома гелия ($Z=2$). Это и является предметом обсуждения в данной работе.

Мы будем использовать также результаты одной из предыдущих наших работ [6].

1. Взаимодействие электронов. Поправка к энергии атома

Полная энергия E_{tot} двухэлектронного атома складывается из энергии атомных электронов $E_{\text{at}} = E_n + E_{n'}$ в поле ядра со значением

$$E_n = -\frac{(Z\alpha)^2 m_e c^2}{2n^2}, \quad n=1, 2, \dots, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}, \quad (1)$$

и энергии взаимодействия электронов E_{ee} , являющейся, вообще говоря, поправкой к E_{at} , но тем не менее сравнимой по величине с E_{at} , в связи с чем вместо теории возмущений и был предложен вариационный метод, применяемый далее в п. 2 с параметром варьирования Z' с заменой $Z \rightarrow Z'$ в волновых функциях и с использованием общих результатов нашей работы [6] применительно к рассматриваемой задаче.

Значение E_{ee} , как известно [4, 5], равно (знаки «+», «-» соответствуют синглетным и триплетным состояниям)

$$E_{ee}^{(\pm)} = K \pm J, \quad (2)$$

где K – усредненная энергия кулоновского взаимодействия:

$$K = e^2 \int dV |\Psi_M(\mathbf{r})|^2 \int dV' |\Psi_{M'}(\mathbf{r}')|^2 \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (3a)$$

а J – т.н. обменная энергия, не имеющая классического аналога:

$$J = e^2 \int dV \Psi_M(\mathbf{r}) \Psi_{M'}^*(\mathbf{r}) \int dV' \Psi_M^*(\mathbf{r}') \Psi_{M'}(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (3б)$$

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>