

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ФУНКЦИИ ЙОСТА ДЛЯ РАСЧЕТА ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА АТОМА ГЕЛИЯ*

В.В. Насыров¹, М.Г. Насырова², Е.И. Крамарь¹

¹Тихоокеанский государственный университет, г. Хабаровск, Россия

²Вычислительный центр ДВО РАН, г. Хабаровск, Россия

Предлагается способ расчета связанных состояний атома гелия, основанный на поиске корней функции Йоста для процесса рассеяния электрона на однократно ионизированном ионе гелия. Получено дифференциальное уравнение для функций Йоста.

Ключевые слова: атом гелия, связанное состояние, функция Йоста, дифференциальное уравнение.

Введение

Невозможность точного аналитического решения уравнения Шредингера, описывающего состояние двухэлектронной атомной системы, привело к появлению достаточно большого количества численных методов построения волновых функций, удовлетворяющих уравнению

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_{r_1} - \frac{1}{2}\Delta_{r_2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2),$$

которые в случае дискретного спектра должны удовлетворять условиям

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = O(r_{1,2}^l) \text{ при } r \rightarrow 0,$$

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow \infty.$$

Однако все методы, по сути, являются разновидностями только двух подходов: применение теории возмущений и разложения по дискретным наборам базисных функций. Каждый из подходов имеет известные недостатки. Например, в методах теории возмущений разложение уже до второго порядка малости приводит к весьма громоздким выражениям, в которых сложно проследить физический смысл. В методах, использующих разложения по базисам, для улучшения сходимости приходится использовать большое количество масштабирующих параметров, численные значения которых подбираются эмпирически.

Поэтому, в частности, получают развитие методы построения модельных волновых функций с максимально упрощенной структурой. В настоящей работе предлагается подход, в котором удалось избежать слабых мест предыдущих методов. Нам требуется введение всего одного параметра – эффективного заряда ядра.

Рассмотрим квантово-механическое описание процесса упругого рассеяния частицы с приведенной массой m и импульсом $k = \sqrt{2mE}$ (здесь и далее используются атомные единицы) на сферически симметричном потенциале $V(r)$ вида

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r} + V_{sh}(r), \quad (1)$$

в котором выделены часть с кулоновским поведением и «короткодействующая» часть $V_{sh}(r)$ со следующими свойствами:

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V_{sh}(r) = 0; \quad (2)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r V_{sh}(r) = 0. \quad (3)$$

* Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ, дополнительное соглашение от 1.06.2021 № 075-02-2021-1389.

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>