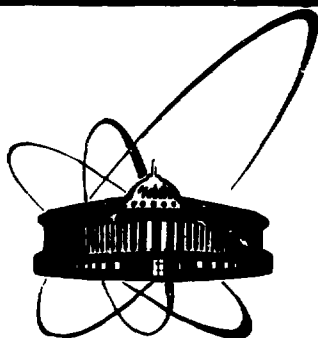


ИИЯИ



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА**

Р4-89-425

**А.Г.Абрашкевич \*, Д.Г.Абрашкевич\*,  
С.И.Виницкий, М.С.Касчиев, И.В.Пузынин**

**ИССЛЕДОВАНИЕ ДВАЖДЫ ВОЗБУЖДЕННЫХ  
СОСТОЯНИЙ  $H^-$  И He  
В МНОГОКАНАЛЬНОМ ГИПЕРСФЕРИЧЕСКОМ  
АДИАБАТИЧЕСКОМ ПОДХОДЕ**

Направлено в "Journal of Physics, B"

\*Ужгородский государственный университет

**1989**

## 1. Введение

Исследование двухкратно и многократно возбужденных состояний атомов и ионов является одной из фундаментальных проблем современной атомной физики. Знание характеристик таких состояний необходимо для решения широкого круга практических задач атомной и молекулярной спектроскопии, физики плазмы, физики верхних слоев атмосферы, квантовой химии, астрофизики и др. С теоретической точки зрения изучение этих состояний важно для понимания динамики сильно коррелированного движения двух и более электронов в атомах и ионах. Наиболее подходящими объектами для теоретических исследований являются атом гелия и двухэлектронные ионы, обладающие богатыми спектрами дважды возбужденных состояний (DES). Гелиеподобный атом — простейшая квантово-механическая система из трех частиц с кулоновским взаимодействием, для которой может быть выполнено тестирование теоретических расчетов [1,6-14] и проведено сравнение с экспериментальными данными [4,5,15-23].

Сильные корреляции электронов в атоме приводят к перемешиванию электронных конфигураций, что затрудняет физическую интерпретацию и классификацию спектров DES в рамках модели независимых частиц, широко используемой в атомной физике. Это обстоятельство стимулирует развитие других подходов, не использующих концепцию независимых электронов. Одним из них является гиперсферический адиабатический (HSA) подход, предложенный в 1968 году И.Мачеком [24] для описания спектров DES атома гелия. В дальнейшем этот метод широко применялся для изучения процессов возбуждения и ионизации в двухэлектронных атомах (см. обзоры [12,14]). В большинстве расчетов в рамках HSA-подхода используется адиабатическое приближение, в котором пренебрегают неадиабатической связью каналов в системе радиальных уравнений (см., напр., [24-28]). Для достижения точности расчетов, сравнимой с другими известными подходами, необходим учет неадиабатических эффектов [29-33]. Исследование сходимости HSA-разложения для основных и DES гелиеподобных систем было выполнено в работах [31,32]. Полученные численные результаты указывают на высокую скорость сходимости HSA-разложения. Это обстоятельство позволяет при расчете спектральных характеристик двухэлектронных атомов обеспечить высокую точность ( $\sim 10^{-4}$  в.е.), ограничиваясь первыми несколькими радиальными уравнениями. В данной работе в многоканальном приближении HSA-подхода исследуются низколежащие DES гелиеподобных систем, для которых существенны электронные корреляции. Численно исследованы угловые и радиальные корреляции. Выполнены систематические расчеты значений энергий  $1s^e$  и  $1p^o$  DES  $H^-$  и  $He$ , сходящихся ко второму ( $n=2$ ) порогу, с учетом неадиабатических поправок с точностью  $\sim 10^{-4}$  в.е.

Обсуждается область применимости адиабатического приближения. Для классификации DES используется молекулярная классификация, предложенная в работе [33].

## 2. Гиперсферическое адиабатическое представление.

### А. Гиперсферический адиабатический базис

В гиперсферическом координатном базисе двухэлектронный атом описывается с помощью шести координат  $\{R, \alpha, \hat{r}_1, \hat{r}_2\}$ , где

$$R = (r_1^2 + r_2^2)^{1/2}, \quad \alpha = \arctan(r_1/r_2), \quad \Omega = \{\alpha, \hat{r}_1, \hat{r}_2\}, \quad \hat{r}_i = \{\theta_i, \varphi_i\}, \quad i=1,2.$$

Здесь  $R$  есть гиперрадиус системы,  $\alpha$  - гиперугол,  $r_1$  и  $r_2$  - расстояния между электронами и ядром,  $\hat{r}_1$  и  $\hat{r}_2$  - обычные угловые переменные электронов. Уравнение Шредингера для двухэлектронного атома с зарядом  $Z$  в гиперсферических координатах имеет вид ( $\hbar = m_e = 1$ ):

$$H \Psi^0(R, \Omega) = 2E \Psi^0(R, \Omega), \quad (1)$$

где

$$H = -\frac{1}{R^5} \frac{\partial}{\partial R} R^5 \frac{\partial}{\partial R} + h(R).$$

Здесь  $h(R)$  есть угловая часть гамильтониана на сфере  $S^5(\Omega)$ , зависящая от  $R$  как от параметра:

$$h(R) = T(R) + R^{-1} V(\alpha, \nu_{12}), \quad (2)$$

где

$$T(R) = -\frac{1}{R^2} \left[ \sin^2 \alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} \sin^2 \alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} - \frac{\hat{L}_1^2}{\cos^2 \alpha} - \frac{\hat{L}_2^2}{\sin^2 \alpha} \right] \quad (3)$$

- кинетическая энергия,

$$V(\alpha, \nu_{12}) = -\frac{2Z}{\cos \alpha} - \frac{2Z}{\sin \alpha} + \frac{2}{(1 - \sin 2\alpha \cos \nu_{12})^{1/2}} \quad (4)$$

- потенциальная энергия,  $\hat{L}_1$  и  $\hat{L}_2$  - орбитальные моменты электронов,  $\nu_{12} = \arccos[(\hat{r}_1 \cdot \hat{r}_2)/r_1 r_2]$ .

В качестве HSA-базиса используется полный набор решений  $\{\Phi_\mu\}_{\mu=1}^\infty \in L^2(S^5)$  спектральной задачи

$$h(R) \Phi_\mu(\Omega; R) = R^2 U_\mu(R) \Phi_\mu(\Omega; R), \quad (5)$$

нормированных условием

$$\langle \Phi_\mu | \Phi_\nu \rangle = \int d\tau \Phi_\mu^*(\Omega; R) \Phi_\nu(\Omega; R) = \delta_{\mu\nu},$$

$$d\tau = \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha \sin \theta_1 \sin \theta_2 d\alpha d\theta_1 d\theta_2 d\varphi_1 d\varphi_2.$$

Здесь  $U_\mu(R)$  - собственные значения (тармы), параметрически зависящие от  $R$  для фиксированного набора квантовых чисел  $\mu$ . Использование точных интегралов движения: полного орбитального момента  $\hat{L}^2$  и его проекции  $M_z$  на ось  $Z$  лабораторной системы координат позволяет

упростить гиперсферическую задачу (5) и выполнить частичный анализ в представлении полного момента:

$$\Phi_{\mu}(\Omega; R) = (\sin \alpha \cos \alpha)^{-1} \sum_{l_1 l_2} g_{l_1 l_2}^{(\mu)}(\alpha; R) \psi_{l_1 l_2}^{L M_{\mu}}(\hat{r}_1, \hat{r}_2). \quad (6)$$

Здесь

$$\psi_{l_1 l_2}^{L M_{\mu}}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) = \sum_{m_1 m_2} C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{L M_{\mu}} Y_{l_1 m_1}(\hat{r}_1) Y_{l_2 m_2}(\hat{r}_2)$$

есть биполярная гармоника,  $Y_{l_i m_i}(\hat{r}_i)$ ,  $i=1,2$ , - сферические функции,  $C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{L M_{\mu}}$  - коэффициент Клебша-Гордена. Подстановка разложения (6) в уравнение (5) и усреднение по  $\psi_{l_1 l_2}^{L M_{\mu}}(\hat{r}_1, \hat{r}_2)$  позволяют представить (5) в виде системы уравнений

$$\left[ \frac{d^2}{d\alpha^2} - \frac{l_1(l_1+1)}{\cos^2 \alpha} - \frac{l_2(l_2+1)}{\sin^2 \alpha} + R^2 U_{\mu}(R) \right] g_{l_1 l_2}^{(\mu)}(\alpha; R) + R \sum_{l'_1 l'_2} \langle \psi_{l_1 l_2}^{L M_{\mu}}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) | V(\alpha, \varphi_{12}) | \psi_{l'_1 l'_2}^{L M_{\mu}}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) \rangle g_{l'_1 l'_2}^{(\mu)}(\alpha; R) = 0, \quad (7)$$

где матричные элементы  $\langle \psi_{l_1 l_2}^{L M_{\mu}} | V(\alpha, \varphi_{12}) | \psi_{l'_1 l'_2}^{L M_{\mu}} \rangle$  определены в [13, 14]. Граничные условия, выражающие ограниченность функции

$g_{l_1 l_2}^{(\mu)}(\alpha; R)$  в нуле и учитывающие принцип Паули, задаются следующим образом [24]:

$$\begin{aligned} g_{l_1 l_2}^{(\mu)}(0; R) &= 0, \\ g_{l_1 l_2}^{(\mu)}(\alpha; R) / \alpha = \pi/4 &= (-1)^{L+S+l_1+l_2} g_{l_1 l_2}^{(\mu)}(\pi/2 - \alpha; R) / \alpha = \pi/4, \\ \frac{d g_{l_1 l_2}^{(\mu)}(\alpha; R) / d\alpha}{d\alpha} / \alpha = \pi/4 &= (-1)^{L+S+l_1+l_2+1} \frac{d g_{l_1 l_2}^{(\mu)}(\pi/2 - \alpha; R) / d\alpha}{d\alpha} / \alpha = \pi/4. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь  $S$  - полный спиновый момент системы, а  $(-1)^{L+S+l_1+l_2} = \pi$  - четность. В конкретных расчетах ограничиваются  $N_{\alpha}$  членами в разложении (6), что приводит к системе  $N_{\alpha}$  уравнений. Для решения системы дифференциальных уравнений (7) мы использовали метод конечных разностей. Задача Штурма-Лиувилля (7)-(8) аппроксимировалась трехточечными конечно-разностными формулами, а получающаяся обобщенная алгебраическая задача на собственные значения решалась методом итерации подпространств [34], позволяющим одновременно вычислять первых несколько собственных значений и собственных функций.

### В. Система радиальных уравнений

Разложение полной волновой функции  $\Psi^{\nu}(R, \Omega)$  по HSA-базису имеет вид

$$\Psi^{\nu}(R, \Omega) = R^{-5/2} \sum_{\mu} F_{\mu}(R) \Phi_{\mu}(\Omega; R). \quad (9)$$

Подстановка разложения (9) в уравнение (I) приводит к системе радиальных уравнений вида

$$\left[ -\frac{d^2}{dR^2} I + V(R) - 2E I \right] F(R) + \frac{d}{dR} [Q(R) F'(R)] + Q(R) \frac{dF(R)}{dR} = 0, \quad (10)$$

где  $I$ ,  $V$  и  $Q$  являются квадратными матрицами, определяемыми соотношениями:

$$I_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}, \quad \mu, \nu = 1, 2, \dots$$

$$V_{\mu\nu}(R) = [-0.25R^{-2} + U_{\mu}(R)]\delta_{\mu\nu} + H_{\mu\nu}(R), \quad (II)$$

$$H_{\mu\nu}(R) = H_{\nu\mu}(R) = \left\langle \frac{d\Phi_{\mu}(\Omega; R)}{dR} \left| \frac{d\Phi_{\nu}(\Omega; R)}{dR} \right. \right\rangle, \quad (I2)$$

$$Q_{\mu\nu}(R) = -Q_{\nu\mu}(R) = - \left\langle \Phi_{\mu}(\Omega; R) \left| \frac{d\Phi_{\nu}(\Omega; R)}{dR} \right. \right\rangle.$$

Здесь символ  $\langle \cdot | \cdot \rangle$  означает интегрирование по переменной  $\alpha$  и суммирование по перем  $l_1$  и  $l_2$ . Систему радиальных уравнений (I0) необходимо дополнить граничными условиями

$$F_{\mu}(0) = F_{\mu}(\infty) = 0, \quad \mu = 1, 2, \dots \quad (I3)$$

При численном решении системы (I0) обычно ограничиваются конечным числом уравнений  $N_R$  и заменяют полубесконечный интервал по переменной  $R$  конечным  $R \in [0, R_{max}]$ .

Для вычисления производных HSA-функций по  $R$  в выражениях (II) и (I2) мы использовали конечно-разностные формулы четвертого порядка точности, в таблично заданные потенциалы  $V_{\mu\nu}$  и  $Q_{\mu\nu}$  интерполировались с помощью кубической сплайн-интерполяции. Решение спектральной задачи (I0), (I3) осуществлялось методом конечных элементов с использованием схем высокого порядка точности [35]. Для конечно-элементной аппроксимации задачи (I0), (I3) были использованы изопараметрические лагранжевы элементы четвертого порядка, обеспечивающие точность  $O(h_R^4)$  относительно собственных чисел ( $h_R$  - максимальный шаг конечноэлементной сетки). Построение сетки, аппроксимация, решение алгебраической задачи на собственные значения и программная реализация в виде пакета HSAТОМ подробно рассмотрены в работах [35, 36].

### 3. Результаты и обсуждения

#### А. Потенциальные кривые и матричные элементы радиальной связи

Для вычисления термов  $U_{\mu}(R)$  и собственных функций  $g_{l_1 l_2}^{(\mu)}(\alpha; R)$  с заданной точностью (в данной работе она  $\sim 10^{-4}$ - $10^{-5}$  а.е.) требуется исследовать зависимость этих величин от числа уравнений  $N_{\alpha}$  системы (?) или, что эквивалентно, от значения  $l_{max} = \max(l_1, l_2)$  (угловые корреляции) и числе узлов  $n_{\alpha}$  конечно-разностной сетки по переменной  $\alpha$  (радиальные корреляции) для различных значений гиперрадиуса  $R$ . Такие исследования были выполнены нами для  ${}^1S^e$  и  ${}^1P^o$  термов и матричных элементов He и H<sup>-</sup>. В таблице I приведена зависимость  ${}^1S^e$  термов He от значения  $l_{max}$  и числе узлов сетки  $n_{\alpha}$  для двух значений гиперрадиуса  $R=1$  и 15. Анализ этой таблицы показывает, что сходимость термов

Таблица 1. Сходимость  $1s^e$  термов  $U_{\mu}$ ,  $\mu=1,3$ , (в Ry) He в зависимости от значения  $l_{max} = \max(l_1, l_2)$  и числа узлов  $n_d$  конечно-разностной сетки для двух значений гиперрадиуса  $R=1$  и 15

$l_{max}$	$n_d$	$U_1(R=1)$	$U_3(R=1)$	$U_1(R=15)$	$U_3(R=15)$
2	100	-7.91163	18.54512	-4.08178	-1.12124
3	100	-7.91303	18.54254	-4.08178	-1.12125
4	100	-7.91313	18.54171	-4.08178	-1.12125
5	100	-7.91376	18.54135	-4.08178	-1.12125
"	100	-7.91387	18.54117	-4.08178	-1.12125
7	100	-7.91393	18.54107	-4.08178	-1.12125
8	100	-7.91397	18.54100	-4.08178	-1.12125
9	100	-7.91399	18.54097	-4.08178	-1.12125
3	200	-7.91334	18.54559	-4.12201	-1.12133
3	300	-7.91340	18.54615	-4.12964	-1.12133
3	500	-7.91343	18.54644	-4.13358	-1.12133
3	700	-7.91343	18.54652	-4.13465	-1.12133

$U_{\mu}(R)$  в зависимости от  $l_{max}$  и  $n_d$  с увеличением  $R$  быстро улучшается. Заметим, что широко применяемое в расчетах разложение НСА-функций по  $\mathcal{K}$ -гармоникам - собственным функциям оператора гипермомента  $\mathcal{K}^2$  из  $L^2(S^5)$  [39] - с возрастанием  $R$  сходится очень медленно [12, 14, 40, 41]. Это различие в поведении базисных НСА-функций объясняется тем обстоятельством, что мы решаем систему дифференциальных уравнений (7) по переменной  $\alpha$  численно с заданной точностью, а не используем разложение решения (7) по полиному Якоби, что имеет смысл лишь в окрестности точки  $R=0$ . Быстрая сходимость разложения НСА-функций по биполярным гармоникам с ростом  $R$  свидетельствует о том, что полученные нами функции  $\Phi_{\mu}(S; R)$  являются подходящим базисом для описания процессов возбуждения в двухэлектронных атомах. Этот вывод подтверждают также результаты численных исследований потенциальных кривых для  $1s^e$  и  $1p^o$  состояний  $H^-$  [32, 42].

Исследуем теперь зависимость радиальных метричных элементов  $Q_{\mu\nu}(R)$  и  $H_{\mu\nu}(R)$  от  $l_{max}$  и  $n_d$ . Известно, что свои максимальные значения они принимают в окрестности точек квазипересечения  $R_c$  (см., напр., [12]). Поэтому представляет интерес численные исследования сходимости  $Q_{\mu\nu}(R)$  и  $H_{\mu\nu}(R)$  выполнить для  $R=R_c$ . В таблицах 2 и 3 представлена зависимость  $Q_{23}$ ,  $U_{\mu}$  и  $H_{\mu\mu}$ ,  $\mu=2,3$  от значений  $l_{max}$  и  $n_d$  для  $1p^o$  состояний  $H^-$  и He в точках квазипересечений  $R_c=13,66$  и  $R_c=7,65$  соответственно. В таблице 3 дано также сравнение значений  $Q_{23}$ ,  $U_2$  и  $U_3$  с результатами других расчетов [37, 38]. Анализ таблиц 3 и 4 показывает, что метричные элементы  $Q_{23}$ ,  $H_{22}$  и  $H_{33}$  для  $H^-$  растут с увеличением  $l_{max}$  и убывают с ростом числа узлов сетки  $n_d$ , тогда как для He справедливы обратная зависимость. Величина расщепления между термами  $U_3-U_2$  с увеличением  $l_{max}$  и  $n_d$  умень-

Таблица 2. Сходимость  $H^{-1}P^0$  термов  $U_2$ ,  $U_3$  и радиальных матричных элементов  $Q_{23}$ ,  $H_{22}$  и  $H_{33}$  в зависимости от значения  $l_{\max}$  и числа узлов  $n_\alpha$  конечно-разностной сетки в окрестности точки квазипересечения  $R=13,66$

$l_{\max}$	$n_\alpha$	$-U_2$	$-U_3$	$Q_{23}$	$H_{22}$	$H_{33}$
2	300	0.266476	0.262669	1.00668	1.01483	1.01363
3	300	0.266703	0.262721	0.9552	0.91362	0.91247
4	300	0.266705	0.262726	0.9560	0.91519	0.91403
5	300	0.266705	0.262727	0.9562	0.91545	0.91430
6	300	0.266706	0.262728	0.9563	0.91573	0.91457
3	400	0.266709	0.262719	0.9534	0.91019	0.90904
3	500	0.266712	0.262718	0.9525	0.90853	0.90737
3	600	0.266713	0.262717	0.9524	0.90830	0.90715
3	700	0.266714	0.262717	0.9522	0.90800	0.90685
3	800	0.266714	0.262717	0.9519	0.90732	0.90616

Таблица 3. Сходимость  $He^{-1}P^0$  термов  $U_2$ ,  $U_3$  и радиальных матричных элементов  $Q_{23}$ ,  $H_{22}$  и  $H_{33}$  в зависимости от значения  $l_{\max}$  и числа узлов  $n_\alpha$  конечно-разностной сетки в окрестности точки квазипересечения  $R=7,65$

$l_{\max}$	$n_\alpha$	$-U_2$	$-U_3$	$Q_{23}$	$H_{22}$	$H_{33}$
2	300	1.303811	1.302012	-0.9549	91.1817	91.1858
3	300	1.303979	1.302093	9.2230	85.0635	85.0678
4	300	1.304010	1.302116	9.1984	84.6109	84.6153
5	300	1.304019	1.302125	9.2027	84.6907	84.6950
6	300	1.304024	1.302129	9.1962	84.5701	84.5744
3	400	1.303967	1.302127	9.4427	89.1647	89.1690
3	500	1.303961	1.302142	9.5621	91.4334	91.4377
3	600	1.303958	1.302151	9.6229	92.5996	92.6039
3	700	1.303956	1.302156	9.6442	93.0098	93.0141
3	800	1.303955	1.302160	9.6892	93.8808	93.8851
a		1.30396	1.30218			
b		1.30400	1.30220	9.7419		

a Miller and Starace [37,38]

b Christensen-Dalsgaard [38]

шестая, разность же  $H_{33}-H_{22}$  практически не меняется для всех  $l_{\max}$  и  $n_\alpha$ . При этом скорость сходимости матричных элементов, являющихся интегральной характеристикой качества базисных функций, существенно ниже, чем у термов.

В данной работе при вычислении термов  $U_\mu(R)$  и собственных функций  $g_{\ell, \ell_2}^{(\mu)}(\alpha; R)$  были использованы следующие значения параметров  $l_{\max}(N_\alpha)$  и  $n_\alpha$ : а)  $H^{-1}S^e - l_{\max}=7$  ( $N_\alpha=8$ ) и  $n_\alpha=440$ , б)  $H^{-1}P^0 - l_{\max}=3$  ( $N_\alpha=6$ ) и  $n_\alpha=700$ , в)  $He^{-1}S^e - l_{\max}=8$  ( $N_\alpha=9$ ) и  $n_\alpha=500$ , г)  $He^{-1}S^e - l_{\max}=4$  ( $N_\alpha=8$ ) и  $n_\alpha=720$ . В каждой точке

по  $R \in [0, 60]$  одновременно вычислялись первые 6 (4) термов и соответствующих собственных функций для  ${}^1S^0({}^1P^0)$  состояний  $H^-$  и  $He$ . При больших значениях  $R$  матричные элементы  $Q_{\mu\nu}(R)$  и  $V_{\mu\nu}(R)$  вычислялись по асимптотическим формулам. Для диагональных матричных элементов  $V_{\mu\mu}(R)$  мы использовали асимптотические разложения с точностью  $O(R^{-3})$  [24, 30]. Недиагональные матричные элементы  $Q_{\mu\nu}(R)$  и  $H_{\mu\nu}(R)$  ведут себя при  $R \rightarrow \infty$  как с  $R^{-1}$  и  $dR^{-2}$  соответственно [38]. Константы  $c$  и  $d$  определялись из условия сшивки с численными значениями.

### В. Классификация дважды возбужденных состояний

В настоящее время имеется несколько классификационных схем для DES. Среди них наиболее известными являются "+" и "-" классификация Купера, Фано и Претса [43], эмпирическая схема Коннили и Липского [44], теоретико-групповая классификация Геррике и Синаногду [45], полуэмпирическая гиперсферическая классификация Лина [46] и молекулярно-орбитальная классификация Фигина и Бриггса [47]. На практике чаще используются классификационные схемы Коннили и Липского и Лина (см., напр., [14, 27, 28, 49-52]). Подробное обсуждение и сравнение различных классификаций можно найти в работах [14, 47, 49, 53, 54].

В данной работе используется классификация DES, предложенная в работе [33]. Она базируется на общей классификации состояний HSA-базиса [55], однозначно устанавливаемой в молекулярной системе координат [56].

Рассмотрим два предельных случая:  $R \rightarrow 0$  - предел объединенного атома и  $R \rightarrow \infty$  - предел разъединенного атома. При  $R \rightarrow 0$  состояния HSA-базиса задачи (5) характеризуются набором квантовых чисел  $\mu = \{L, M_L, \pi, \mathcal{K}\}$ , где гипермомент  $\mathcal{K}$  фиксирует значение центробежной энергии  $U_{\mu}^{(0)} = \mathcal{K}(\mathcal{K}+4)/2R^2$ . В отсутствие взаимодействия орбитальные квантовые моменты электронов  $l_1$  и  $l_2$  являются хорошими квантовыми числами, т.е. по ним есть вырождение при фиксированном значении  $\mathcal{K}$ . Включение взаимодействия  $V(\alpha, \nu_{12})$  снимает вырождение. В качестве функций нулевого приближения естественно использовать линейные комбинации стандартных  $\mathcal{K}$ -гармоник из  $L^2(S^2)$  [39]

$$\Phi_{\mu}^{(0)}(\Omega) = \sum_{\{l_1, l_2\} \in \mu} b_{\mathcal{K}}^{(0)} \Phi_{\mathcal{K}}(\Omega), \quad (14)$$

где  $\Phi_{\mathcal{K}}(\Omega) = \phi_{\kappa l_1 l_2}(\alpha) y_{l_1 l_2}^{L M_L}(\hat{r}_1, \hat{r}_2)$ ,  
 $\phi_{\kappa l_1 l_2}(\alpha) = N_{\kappa l_1 l_2} \sin^{\frac{l_1}{2}} \alpha \cos^{\frac{l_2}{2}} \alpha P_{\kappa}^{(l_1+1/2, l_2+1/2)}(\cos 2\alpha)$ ,  
 $N_{\kappa l_1 l_2}$  - нормировочный коэффициент,  $P_{\kappa}^{(l_1+1/2, l_2+1/2)}(\cos 2\alpha)$  - полином Якоби,  $\mathcal{K} = \{\mathcal{K}, l_1, l_2\}$  - мультииндекс,  $\mathcal{K} = l_1 + l_2 + 2\kappa$ ,



$K=0,1,2,\dots$ , - число узлов полинома Якоби. Коэффициенты  $b_{\mathcal{X}}^{(\mu)}$  определяются одновременно с первой поправкой  $U_{\mu}^{(1)}$  к терму  $U_{\mu}(R)$ :

$$U_{\mu}(R) = U_{\mu}^{(0)} + U_{\mu}^{(1)}R^{-1} + U_{\mu}^{(2)} + O(R) \quad (15)$$

из уравнения

$$\sum_{\{l'_1, l'_2\} \in \mathcal{X}} \left\{ \langle L M_L \pi \mathcal{X} l_1 l_2 | V(\alpha, \nu_{12}) | L M_L \pi \mathcal{X} l'_1 l'_2 \rangle - U_{\mu}^{(2)} \delta_{l_1 l'_1} \delta_{l_2 l'_2} \right\} b_{l'_1 l'_2} = 0. \quad (16)$$

Состояния  $HSA$ -базиса характеризуются теперь набором квантовых чисел  $\mu = \{L M_L \pi \mathcal{X} \nu\}$ , где значения индекса  $\nu = \nu(l_1, l_2)$  перенумеровываются в порядке возрастания корни  $U_{\mu}^{(2)}$  секулярного уравнения (16) при фиксированных  $\{L M_L \pi \mathcal{X}\}$ . Переход в молекулярное представление [33] позволяет определить кратность вырождения по  $l_1$  и  $l_2$  при фиксированных значениях  $L, M_L, \pi$  и  $\mathcal{X}$ . При перестановке электронов имеет место соотношение  $\pi(-1)^S = p, p = +1$  (*gerade*) или  $-1$  (*ungerade*), которое связывает четные (*g*) и нечетные (*u*) молекулярные состояния со значением полного спина  $S$ . Это позволяет при фиксированных  $S$  и  $\pi$  указать дополнительную *g*- или *u*-четность базисных  $HSA$ -функций. Таким образом, полная классификация  $HSA$ -базиса при  $R \rightarrow 0$  однозначно определяется набором квантовых чисел  $\mu = \{L M_L S \pi \mathcal{X} \nu\}_{(p)}$ .

Исследование асимптотик термов и состояний  $HSA$ -базиса в пределе разведенного атома  $R \rightarrow \infty$  подробно рассмотрено в [33]. Для построения классификации  $HSA$ -состояний необходимо учесть в разложении

$$U_{\mu}(R) = -\frac{\mathcal{Z}^2}{n^2} - \frac{\mathcal{Z}(\mathcal{Z}-1)}{R} + U_{\mu}^{(2)}R^{-2} + O(R^{-3}) \quad (17)$$

члены  $\sim R^{-2}$ , которые снимают кулоновское вырождение в слое параболических состояний  $|n_1 n_2 m\rangle$  с фиксированным главным числом  $n = n_1 + n_2 + m + 1, m = |m|$ . Эквивалентный оператор, соответствующий возмущению  $\sim R^{-2}$ , имеет вид [33, 48]

$$\tilde{\Lambda}^{(0)} = -\frac{3}{2} \frac{n}{\mathcal{Z}} A_z + \frac{1}{2} \left[ \frac{3}{2} \vec{\ell}_i^2 - \left( \frac{1}{2} n^2 + 4 \right) \right] + \frac{1}{2} (\vec{L}^2 - 2 \vec{\ell}_i \vec{L}).$$

Здесь  $A_z$  - проекция вектора Рунге-Ленца на молекулярную ось  $z$ , направленную вдоль вектора  $\vec{r}_i, i=1$  или  $2$  (это зависит от того, какой из электронов мы удаляем от ядра). Собственные значения и собственные функции оператора  $\tilde{\Lambda}^{(0)}$  представляют искомые поправки  $U_{\mu}^{(2)}$  в разложении (17) и правильные функции нулевого приближения  $\Phi_{\mu}^{(0)}(\Omega)$ . В качестве  $\Phi_{\mu}^{(0)}(\Omega)$  используются линейные комбинации кулоновских параболических функций  $\varphi_{n_1 n_2 m}^{(0)}(\mu, \nu)$ ,  $\mu = z+z, \nu = z-z$ , во вращающейся системе координат в представлении полного момента [33]

$$\Phi_{\mu}^{(0)}(\Omega) = \sum_m^{\min(l_1, n-1)} \sum_{n_2}^{n-m-1} \alpha_{n_2 m}^{(\nu)} \varphi_{n_1 n_2 m}^{(0)}(\mu, \nu) \mathcal{D}_{m M_L}^{L \pi}(\Phi, \Theta, \Psi), \quad (18)$$

где  $\mathcal{D}_{m M_L}^{L \pi}$  -  $\mathcal{D}$ -функции Вигнера, определенные в [33, 56].

Искомые поправки  $U_m^{(2)}$  и коэффициенты  $\alpha_{n_2 m}^{(n)}$  определяются из решения алгебраического уравнения:

$$\sum_{m'} \sum_{n_2'}^{n-m-1} \left[ \langle n_1 n_2 m | M_L \pi | \tilde{L}^{(0)} | n_1' n_2' m' | M_L \pi \rangle - U_m^{(2)} \delta_{n_2 n_2'} \delta_{m m'} \right] \alpha_{n_1 m'}^{(n)} = 0 \quad (19)$$

Таким образом, состояния  $HSA$ -базиса будут характеризоваться набором квантовых чисел  $\mu = \{L M_L \pi n q\}$ , где значения  $q = q(n_2, m)$  нумеруют в порядке возрастания корни  $U_m^{(2)}$  секулярного уравнения (19) при фиксированных  $L, M_L, \pi, n$ . В пределе разьединенного атома состояния вырождены по четности  $p = g, u$ . Поэтому для описания рассеяния электрона на одноэлектронном атоме естественно перейти к  $(a, b)$ -представлению:  $|\alpha\rangle = 2^{-4q}(|g\rangle + |u\rangle)$ ,  $|\beta\rangle = 2^{-4q}(|g\rangle - |u\rangle)$ .

В результате имеем полную классификацию  $HSA$ -базиса при  $R \rightarrow \infty$   
 $\mu = \{L M_L S \pi n q\}_{(p)}$ ,  $p = a, \beta$ .

Связь между  $\{X\nu\}$  и  $\{nq\}$  классификациями устанавливается с помощью корреляционных диаграмм - сравнением термов, вычисленных по формулам (15) и (17), с численными термами. Примеры таких корреляционных диаграмм и сопоставление  $HSA$ -классификаций  $\mu = \{X\nu\}$  и  $\mu = \{nq\}$  со стандартной адиабатической  $\mu = \{Nlm\}$  [56] классификацией разьединенного атома  $\mu = \{n_1 n_2 m\}$  [56] и с  $\mu = \{n k T\}$  классификацией Геррика и Синаноглу [45] приведены в работе [33]. В этой работе также показано, что точки квазипересечения в  $HSA$ -представлении соответствуют точкам точного пересечения термов стандартной задачи двух центров с разделяющимися переменными [75]. При переходе к гиперсферическому адиабатическому ( $HSD$ ) представлению [24, 25, 27] квазипересечения становятся точными пересечениями. В этом случае необходимо соответствующую пару состояний  $\mu = \{nq\}$  поменять местами в соответствии с корреляционной диаграммой задачи двух центров [75]. Таким образом,  $HSA$ -базис по сути соответствует адиабатическому базису интегрируемой задачи двух центров с разделяющимися переменными.

Полная классификация  $DES$  базируется на молекулярной классификации состояний  $HSA$ -базиса. Обозначим  $DES$  символом  $2S+1 L^\pi \nu(X, \nu)_p$  (предел объединенного атома) или  $2S+1 L^\pi \nu(n, q)_p$  (предел разьединенного атома), где  $p = g$  или  $u$  ( $p = (-1)^S \pi$ ). Здесь  $\nu$  имеет смысл вибрационного квантового числа. Наличие взаимно однозначного соответствия между парами  $\{X\nu\}$  и  $\{nq\}$ , устанавливаемого с помощью корреляционных диаграмм, позволяет пользоваться обеими классификациями для обозначения одного и того же состояния. Квантовые числа  $\{nq\}$  более подходит для описания процессов возбуждения атомов или ионов электронным ударом, в то время как числа  $\{X\nu\}$  полезнее при рассмотрении двухэлектронной ионизации.

Таблица 4. Соответствие между различными классификациями DES двух-электронных систем ниже второго порога. Значения  $L, S$  и  $\pi$  являются общими для всех схем. Другие квантовые числа, используемые для классификации DES в различных схемах, имеют следующий смысл:  $n$  - главное квантовое число разьединенного атома,  $\tilde{n}$  - главное квантовое число внешнего электрона, индекс  $\alpha = a, b, c$  обозначает различные резонансные серии,  $k = n_2 - n_1$ ,  $T = m$ , где  $n_1, n_2, m$  - параболические квантовые числа,  $A = \frac{1}{2}I$  и 0. Остальные квантовые числа объясняются в тексте

Состояние	Наименьший номер серии	Cooper, Fano and Prats [40]	Lipsky and Conneely [44] ( $n, \tilde{n}, \alpha$ )	Lin [46] $\tilde{n}(kT)_n^A$	Fearin and Briggs [47] $v(Nlm)_p$	данная работа $v(n, q)_p$
$2S+1 L^\pi$	$\tilde{n}$					
$1 e$	$3$	$2s\tilde{n}s+2p\tilde{n}p$	$(2, \tilde{n}, a)$	$\tilde{n}(1, 0)_2^+$	$v(3d6_e)$	$v(2, 0)_g$
		$2s\tilde{n}s-2p\tilde{n}p$	$(2, \tilde{n}, b)$	$\tilde{n}(-1, 0)_2^+$	$v(2s6_g)$	$v(2, 1)_g$
$1 p^o$	$2$	$s\tilde{n}p+\tilde{n}s2p$	$(2, \tilde{n}, a)$	$\tilde{n}(0, 1)_2^+$	$v(2p\kappa_u)$	$v(2, 0)_u$
		$2s\tilde{n}p-\tilde{n}s2p$	$(2, \tilde{n}, b)$	$\tilde{n}(1, 0)_2^-$	$v(4f6_u)$	$v(2, 1)_u$
		$2p\tilde{n}d$	$(2, \tilde{n}, c)$	$\tilde{n}(-1, 0)_2^0$	$v(3p\epsilon_u)$	$v(2, 2)_u$

В данной работе для классификации DES мы использовали символ  $2S+1 L^\pi v(n, q)_p, p = g, u$ . В таблице 4 приведено соответствие между различными классификациями DES ниже второго порога. Отметим, что в данной работе при расчете уровней энергии DES используется многоканальное приближение HSA-подхода. В этом случае при наличии точек квазипересечения нет необходимости переходить к HSD-представлению, как это часто делается в расчетах при использовании адиабатического приближения [25, 27, 28, 38, 42]. Например, для обозначения  $^1P^o$  DES, сходящихся к  $n \approx 2$  порогу, следует использовать обозначения  $v(2, 0)_u$  и  $v(2, 1)_u$  для первой  $(2, 0)_u$  и второй  $(2, 1)_u$  потенциальных кривых соответственно. В HSD-представлении эти же кривые обозначались бы соответственно  $(2, 1)_u$  и  $(2, 0)_u$  и отвечали бы "+" и "-" или  $(0, 1)^+$  и  $(1, 0)^-$  потенциальным кривым [25, 46]. Это означает, в частности, что классификация Лина [46] соответствует HSD-представлению. Конкретный выбор HSA- или HSD-классификации для DES должен быть согласован с применяемым в конкретных расчетах HSA- или HSD-представлением. Многоканальная реализация HSA-подхода, используемая в данной работе, позволяет рассчитывать спектры DES с высокой точностью и надежно их классифицировать в соответствии с HSA-классификацией.

### С. Отрицательный ион водорода

Результаты вычислений энергий  $1s^e$  и  $1p^o$  DES  $H^-$  в зависимости от числа радиальных уравнений  $N_R$  представлены в таблицах 5 и 6, где они сравниваются с другими теоретическими расчетами. Из таблицы 5 видно,

Таблица 5. Зависимость значений энергии  $1s^e$  DES  $H^-$  ниже второго ( $n=2$ ) порога от числа  $N_R$  радиальных уравнений (в а.е.)

$N_R$	классификация		
	$0(2,0)_g$	$1(2,0)_g$	$2(2,0)_g$
1	-0.148630	-0.125865	-0.124855
2	-0.147168	-0.125768	-0.124847
3	-0.148098	-0.125828	-0.124863
4	-0.148598	-0.125969	-0.124900
5	-0.148654	-0.125993	-0.124907
6	-0.148665	-0.125995	-0.124909
другие расчеты	-0.14849 <sup>a</sup>	-0.12588 <sup>a</sup>	-0.12507 <sup>a</sup>
	-0.148782 <sup>b</sup>		
	-0.148778 <sup>c</sup>		
	-0.147896 <sup>d</sup>	-0.125973 <sup>d</sup>	-0.125012 <sup>d</sup>
	-0.148777 <sup>e</sup>		
	-0.148695 <sup>f</sup>	-0.126015 <sup>f</sup>	-0.124662 <sup>f</sup>
	-0.14879 <sup>g</sup>	-0.125845 <sup>g</sup>	

<sup>a</sup>Lin [57]

<sup>b</sup>Bhatia and Temkin [58]

<sup>c</sup>Ho, Bhatia and Temkin [59]

<sup>d</sup>Conneally and Lipsky [44]

<sup>e</sup>Ho [53]

<sup>f</sup>Macias and Riera [60]

<sup>g</sup>Koyama, Fukuda, Motoyama and Matsuzawa [27]

что для  $4S^e$ -состояний адиабатическое приближение дает очень хорошие значения энергии. Включение связи со вторым каналом немного сдвигает уровни энергии вверх, причем величина этого сдвига быстро уменьшается с ростом номера уровня  $\mathcal{V}$ . Это означает, что угловые корреляции становятся слабее с ростом  $\mathcal{V}$ . Включение третьей оболочки и последующее увеличение числа уравнений меняют в значении энергии лишь 5-6 цифру после запятой, т.е. учет трех оболочек (цести состояний  $NSA$ -базиса) обеспечивает точность расчета не хуже  $10^{-4}$  а.е. Полученные результаты хорошо согласуются (в рамках указанной точности) с результатами других расчетов, полученных с учетом большего числа состояний. Мы не приводим здесь конкретных значений  $R_{max}$  и числа элементов  $n_R$  конечно-элементной сетки, использованных в расчетах, поскольку эти значения меня-

ются в широких пределах для различных состояний  $n$  и  $\nu$  (и атомных систем). Заметим, что значения этих параметров следует выбирать с помощью численных экспериментов так, чтобы обеспечить требуемую точность результата (в данной работе  $10^{-4}$  а.е.).

Таблица 6. Зависимость значений энергии  ${}^1P^0$  DES  $H^-$  возле второго порога от числа  $N_R$  радиальных уравнений (в а.е.)

$N_R$	классификация		
	$0(2,0)_u$	$1(2,0)_u$	$0(2,1)_u$
1	-0.1249014	-0.1247087	-0.1242652
2	-0.1249014	-0.1247087	-0.1243480
3	-0.1259213	-0.1250216	-0.1243502
4	-0.1259325	-0.1250222	-0.1243507
Другие расчеты	-0.125955 <sup>a</sup>	-0.12503 <sup>a</sup>	-0.12382 <sup>a</sup>
	-0.12595 <sup>b</sup>		
	-0.125965 <sup>c</sup>	-0.125015 <sup>c</sup>	-0.12434 <sup>c</sup>
	-0.1259726 <sup>d</sup>	-0.1250233 <sup>d</sup>	
	-0.125948 <sup>e</sup>		-0.124351 <sup>e</sup>
	-0.126098 <sup>f</sup>	-0.125201 <sup>f</sup>	

<sup>a</sup> Lin [25]

<sup>b</sup> Christensen-Dalsgaard [38]

<sup>c</sup> Taylor and Burke; Macek and Burke [61]

<sup>d</sup> Ajmera and Chung [62]

<sup>e</sup> Mendoloski and Reinhardt [63]

<sup>f</sup> Macias and Riera [64].

Рассмотрим теперь  ${}^1P^0$ -резонансы в  $e^-H$  рассеянии. Анализ таблицы 6 показывает, что поведение этих резонансов, отождествляемых с различными потенциальными кривыми, сходящимися ко второму порогу, сильно отличается. Для  ${}^1P^0$   $0(2,1)_u$  резонанса формы включения связи со вторым каналом понижает адиабатическое значение энергии на  $10^{-4}$  а.е. Дальнейшее наращивание числа каналов меняет лишь 5-6 цифру после запятой. Для  ${}^1P^0$   $\nu(2,0)_u$ ,  $\nu=0,1$ , резонансов Фешбаха адиабатическое приближение дает значение энергии выше порога канала и только включение сильной связи между вторым и третьим каналами сдвигает эти резонансы вниз за порог. Сильная связь между вторым и третьим каналами обусловлена наличием точки квазипересечения при  $R=13,66$  между  $(2,0)_u$  и  $(2,1)_u$  потенциальными кривыми, что приводит к ярко выраженным максимумам матричных элементов радиальной связи в окрестности этой точки (см. таблицу 2). Стандартным приемом для устранения сингулярного поведения матричных элементов в точках квазипересечений является переход к HSD-представлению [12,38], в котором квазипересечения термов становятся

точными пересечениями. Это позволяет в одноканальном приближении рассчитывать спектры ВЕС с требуемой точностью [25,38,42], в особенности для высоколежащих состояний [27,28]. В данной работе мы вычислили положения  $1P^o$  резонансов формы и Фешбаха, используя процедуру диабетической интерполяции [24,25] потенциалов в области  $11 < R < 15$ . В этом случае удобнее пользоваться NSD-классификацией, согласно которой  $1P^o$  резонанс формы будет теперь обозначаться символом  $o(2,0)_u$ , а резонансы Фешбаха -  $v(2,1)_u$ ,  $v=c, 1$ . Мы получили следующие значения энергии:  $-0,124372$  а.е. для резонанса формы и  $-0,126019$  а.е. и  $-0,125020$  а.е. для первых двух резонансов Фешбаха соответственно. Эти значения находятся в хорошем согласии с аналогичными расчетами Лина [25], с четырехканальными расчетами данной работы в NSA-представлении, а также с результатами других расчетов (см. таблицу 6).

Таблица 7. Сравнение данного многоканального расчета уровней энергии ВЕС  $H^-$  (в eV) с экспериментальными данными и другими NSA вычислениями. Использовано значение приведенного ридберга  $R_M = 13.19842$  eV. Число в скобках указывает ошибку в последней цифре

Состояние Работа	$1S^e c(2,c)_F$	$1S^e 1(2,c)_E$	$1S^e 2(2,0)_F$	$1P^o c(2,0)_u$
	<u>Теория</u>			
Данный расчет	9.558	10.172	10.201	10.173
[57,25]	9.560	10.175	10.197	10.173
[26]	9.448	10.169		
[65]	9.558			
[27]	9.552	10.176		
	<u>Эксперимент</u>			
[66]	9.56(1)			10.18(15)
[67]	9.558(10)			10.128(10)
[16]	9.59(3)			10.18(3)

В таблице 7 приведено сравнение результатов многоканальных расчетов данной работы для некоторых  $1S^e$  и  $1P^o$  состояний  $H^-$  с имеющимися экспериментальными данными, а также с другими вычислениями, выполненными в рамках различных приближений NSA-подхода. Отметим, что имеется хорошее согласие между теоретическими и экспериментальными результатами.

#### Д. Атом гелия

Атом гелия представляет для изучения особый интерес как с теоретической, так и с экспериментальной точек зрения. Наличие большого

числе экспериментальных данных стимулирует развитие теоретических методов для их объяснения, а теоретические предсказания стимулируют постановку новых экспериментов (см. [4-8, 11-23]). Атом гелия является тестом для большинства теоретических методов, что обусловлено возможностью прямого сравнения теоретических результатов с экспериментальными данными.

В данной работе изучаются  $DES$  He в многоканальном  $HSA$ -подходе, позволяющем учесть большую часть радиальных и угловых корреляций электронов в атоме. В таблицах 8 и 9 представлены результаты вычислений уровней энергии  ${}^4S^*$  и  ${}^4P^o$   $DES$  He в зависимости от числа учтенных оболочек. Полученные результаты сравниваются с другими теоретическими расчетами. Анализ таблиц 8 и 9 подтверждает сделанный в предыдущем разделе вывод о сходимости  $HSA$ -разложения для  $DES$ , хотя скорость сходимости для He несколько ниже, чем для  $H^-$ . Тем не менее, результаты вычислений  $DES$  He в  $HSA$ -подходе показывают, что для достижения требуемой точности ( $\sim 10^{-4}$  а.е.) достаточно ограничиться небольшим числом радиальных уравнений. Из таблиц 8 и 9 видно, что наши расчеты прекрасно согласуются с лучшими вариационными расчетами [53, 58, 70] и методом сильной связи с псевдосостояниями [49], которые дают наиболее точные значения энергии  $DES$ . Результаты, полученные в рамках других подходов [44, 64, 68, 69], находятся в хорошем согласии с нашими расчетами, но несколько уступают им в точности. В таблицах 8 и 9 приведены также результаты гиперсферических расчетов Х.Клара и М.Клара [26], выполненные в приближении Борна-Оппенгеймера (BO), т.е. без учета радиального матричного элемента  $H_{MM}(R)$  при решении уравнения (10). Это приближение дает оценку снизу на уровни энергии [71]. Выполненные нами расчеты энергий  $DES$  в BO приближении в целом согласуются с данными работы [26], однако наши значения лежат на несколько тысячных а.е. ниже. Энергии, вычисленные в адиабатическом приближении (т.е. с учетом поправки  $H_{MM}(R)$ ), обеспечивают в свою очередь оценку сверху. Интересно сравнить адиабатические и BO расчеты с многоканальными, поскольку это есть хороший тест качества выбранного приближения. Выполненное сравнение этих трех приближений показывает, что во всех случаях наши многоканальные энергии попадают в вилку между адиабатическими и BO значениями энергии. Заметим, что для некоторых  $DES$  значения энергии, полученных в [26] в BO приближении (см. таблицы 8 и 9), расположены выше многоканальных результатов и не попадают в вилку. Это обстоятельство свидетельствует о том, что в работе [26] недостаточно учтены угловые и, возможно, радиальные корреляции. Выполненные нами численные исследования  $DES$  He и  $H^-$  для второго ( $n=2$ ) и третьего ( $n=3$ ) порогов показывают, что с увеличением вибрационного числа  $\nu$  вилка между BO и адиабатичес-

Таблица 8. Уровни энергии -E (в а.е.) для  $1s^e$  DES Не ниже  $n=2$  порога

Состояние $v(2, q)_g$	Дневная работа			Klar and Klar [26]	Conneely and Lipsky [44]	Burke and McVicar [68]	Bhatia and Temkin [58]	Ho [53]	Oza [49]	Macias and Riera [60]
	1 канал	3 канала	6 каналов							
0(2,0) <sub>g</sub>	0.772151	0.778002	0.778824	0.81243	0.775245	0.7762	0.778813	0.77787	0.7778	0.778405
1(2,0) <sub>g</sub>	0.584316	0.589393	0.590159	0.60182	0.588142	0.5871	0.590079	0.58992	0.58986	0.589925
2(2,0) <sub>g</sub>	0.542052	0.544563	0.544863	0.54420	0.544019	0.5427			0.54487	0.544878
0(2,1) <sub>g</sub>	0.605546	0.619825	0.621927	0.62226	0.615133	0.5945	0.622748	0.62198	0.62052	0.619277
1(2,1) <sub>g</sub>	0.543870	0.547582	0.547849	0.54592	0.546940	0.5440	0.548234	0.54809	0.54787	0.547759
2(2,1) <sub>g</sub>	0.525622	0.526640	0.527507	0.52648	0.527203	0.5257			0.52762	0.527586

Таблица 9. Уровни энергии -E (в а.е.) для  $1p^o$  DES Не ниже  $n=2$  порога

Состояние $v(2, q)_u$	Дневная работа		Klar and Klar [26]	Lipsky and Conneely [69]	Burke and McVicar [68]	Bhatia and Temkin [70]	Ho [53]	Oza [49]	Macias and Riera [64]
	1 канал	4 канала							
0(2,0) <sub>u</sub>	0.668367	0.692842	0.70929	0.68836	0.6883	0.69289	0.69313	0.6928	0.69213
1(2,0) <sub>u</sub>	0.556999	0.563976	0.57612	0.56292	0.5625	0.56389	0.5640	0.56401	0.56379
2(2,0) <sub>u</sub>	0.530722	0.534367	0.53998	0.53386	0.5335			0.53432	0.53425
0(2,1) <sub>u</sub>	0.550229	0.597014	0.59226	0.58656	0.5963	0.59708	0.59707	0.59707	0.59730
1(2,1) <sub>u</sub>	0.527573	0.546450	0.54178	0.54621	0.5448			0.54647	0.54613
2(2,1) <sub>u</sub>	0.517815	0.527351	0.52481	0.52713	0.5263			0.52729	0.52711
0(2,2) <sub>u</sub>	0.545163	0.547096	0.54962	0.54681	0.5462		0.54692		0.54701
1(2,2) <sub>u</sub>	0.526375	0.527513	0.52826	0.52745	0.5270				0.52755
2(2,2) <sub>u</sub>	0.517343	0.518014	0.51835	0.51802					0.51787



Таблица 10. Сравнение вычисленных в данной работе значений энергии (в eV) DES He с экспериментальными данными [15,23,17,18] и прецизионными расчетами Оза [49]

Состояние	Madden and Codling [15]	Morgan and Ederer [23]	Oza <sup>a)</sup> [49]	Данная работа <sup>b)</sup>	Hicks and Comer [18] <sup>c)</sup>	Gelebart et al [17] <sup>c)</sup>	Oza <sup>b)</sup> [49]	Данная работа <sup>b)</sup>
$1P^0_0(2,0)_u$	60.133±0.015	60.151±0.010	60.155	60.154	60.15	60.15	60.155	60.162
$1P^0_1(2,0)_u$	63.655±0.007	63.655±0.010	63.659	63.660	63.67±0.03		63.667	63.684
$1P^0_2(2,0)_u$	64.466±0.007	64.466	64.466	64.465	64.47±0.03		64.475	64.474
$1P^0_0(2,1)_u$	62.758±0.010		62.759	62.761				
$1P^0_1(2,1)_u$	64.141±0.016		64.136	64.137				
$1P^0_2(2,1)_u$	64.667±0.017		64.658	64.656				
$1S^e_0(2,0)_g$					57.84±0.04	57.80±0.03	57.849	57.822
$1S^e_1(2,0)_g$					62.96±0.03		62.964	62.956
$1S^e_2(2,0)_g$					64.20±0.03		64.198	64.188
$1S^e_0(2,1)_g$					62.08±0.03	62.12±0.03	62.130	62.092

a) Используется приведенный ридберг  $R_M=13.605975$  eV

b) Используется значение ридберга  $R_\infty=13.605826$  eV

c) Все экспериментальные энергии DES перенормированы по отношению к  $1P^0$  резонансу при 60.15 eV.

кими значениями быстро уменьшается. Это означает, что для высоковозбужденных состояний хорошим приближением является одноканальное адиабатическое приближение. Другими словами, роль неадиабатических поправок с ростом  $\nu$  становится незначительной, т.е. предположение о сепарабельности радиального движения по гиперрадиусу  $R$  и углового движения по поверхности сферы  $S^2$  выполняется для высоковозбужденных состояний с хорошей точностью.

В таблице I<sub>0</sub> приведено сравнение  $HSA$ -расчетов  $DES$   $He$  с экспериментальными данными, полученными в экспериментах по фотопоглощению [15,23] и инъекции электронов в процессе автоионизации [17,18]. Для сравнения приведены также прецизионные расчеты Озы [49], выполненные методом сильной связи каналов с учетом псевдосостояний. Наши результаты хорошо согласуются с расчетами Озы [49] и с экспериментальными данными.

#### 4. Заключение

В данной работе в рамках многоканального  $HSA$ -подхода исследованы  $DES$   $H^-$  и  $He$ , сходящиеся ко второму порогу. Численно изучено влияние угловых и радиальных корреляций на скорость сходимости значений термов и матричных элементов неадиабатической связи. Рассмотрено поведение этих матричных элементов в окрестности точек квазипересечения термов. Для классификации  $DES$  использована схема, базирующаяся на молекулярной классификации состояний  $HSA$ -базиса. Рассмотрены особенности классификации  $DES$  в  $HSA$ -и  $HSD$ -представлениях. Приведены результаты многоканальных расчетов  ${}^4S^o$  и  ${}^4P^o$   $DES$   $H^-$  и  $He$ . Выполнено сравнение полученных результатов с другими теоретическими расчетами и экспериментом. Обсуждается также область применимости адиабатического приближения.

В данной работе мы ограничились расчетами положений резонансных состояний двухэлектронных систем. Интересно провести аналогичное исследование не только положений, но и ширин автоионизационных состояний. До настоящего времени в  $HSA$ -подходе нет систематических расчетов ширин автоионизационных состояний для двухэлектронных атомов даже в адиабатическом приближении.

В работах [72] дана адиабатическая формулировка многоканальной задачи рассеяния в системе трех частиц с учетом перераспределения и развала на основе уравнений Фаддеева, ориентированная на расчет процессов ионного катализа [73,74]. Интересно применить этот подход для исследования процессов возбуждения и ионизации в двухэлектронных атомах и рассчитать сечения рассеяния и параметры резонансных состояний в рамках многоканального  $HSA$ -подхода. Эти вопросы будут рассмотрены в следующих работах.

В заключение авторы выражают благодарность И.Ботеро, В.Н.Островскому и В.Ю.Пойде за полезные обсуждения.

### Литература

1. P.G.Burke and K.Smith, Rev. Mod. Phys. 34, 458 (1962).
2. P.G.Burke, Adv. Atom. Mol. Phys. 4, 173 (1968).
3. K.Smith, The Calculation of Atomic Collision Processes (J.Wiley, New York, 1971).
4. G.J.Schulz, Rev. Mod. Phys. 45, 378 (1973).
5. D.E.Golden, Adv. Atom. Mol. Phys. 14, 1 (1978).
6. J.Callaway, Phys. Rep. 45, 89 (1978).
7. W.P.Reinhardt, Comput. Phys. Comm. 17, 1 (1979).
8. J.Callaway, Adv. Phys. 29, 771 (1980).
9. D.R.Herrick, Adv. Chem. Phys. 52, 1 (1983).
10. C.F.Fischer, The Hartree-Fock Method for Atoms (J.Wiley, New York, 1977).
11. Y.K.Ho, Phys. Rep. 99, 1 (1983).
12. U.Fano, Rep. Progr. Phys. 46, 97 (1983).
13. U.Fano and A.R.P. Rau, Atomic Collisions and Spectra (Academic Press, New York, 1966).
14. C.D.Lin, Adv. Atom. Mol. Phys. 22, 77 (1986).
15. R.P.Madden and K.Codling, Astrophys. J. 141, 364 (1965); Phys. Rev. Lett. 10, 318 (1963).
16. J.S.Risley, A.K.Edwards and R.Geballe, Phys. Rev. A, 9, 1115 (1974).
17. F.Gelebart, R.J.Tweed and J.Perese, J.Phys. B, 9, 1739 (1976).
18. P.J.Hicks and J.Comer, J.Phys. B6, 1666 (1973).
19. J.H.Bizau et al., Phys. Rev. Lett. 48, 588 (1982).
20. P.P.Woodruff and J.A.R.Samson, Phys. Rev. A 25, 848 (1982).
21. B.Cederquist, M.Kisielinski, and S.Mannervik, J.Phys. B 16, L479 (1983).
22. B.C.Bryan et al, Phys. Rev. A 27, 2889 (1983).
23. R.D.Morgan and D.L.Ederer, Phys. Rev. A29, 1901 (1984).
24. J.H.Macek, J.Phys. B, 1, 631 (1966).
25. C.D.Lin, Phys. Rev. Lett. 35, 1150 (1975).
26. I.Klar and M.Klar, J. Phys. B, 13, 1057 (1980).
27. F.Koyama, H.Fukuda, T.Motoyama, M.Matsuzawa, J.Phys. B 19, L331 (1986).
28. F.Koyama, A.Takafuji and M.Matsuzawa, J.Phys. B 22, 553 (1989).
29. C.H.Greene, Phys. Rev. A 23, 661 (1981).
30. J.E.hornos, S.W.MacDowell and C.D.Caldwell, Phys. Rev. A33, 2212 (1986).

31. A.G.Abrashkevich et al, Phys.Lett.A 130, 140 (1988).
32. А.Г.Абрашкевич и др. Препринт ОИЯИ Р4-88-640, Дубна, 1988.
33. А.Г.Абрашкевич, Д.Г.Асрашкевич, С.И.Виницкий, И.В.Лузгин. Препринт ОИЯИ. Р4-89-311, Дубна, 1989.
34. K.C.Bathe, Finite element procedures in engineering analysis (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1982).
35. А.Г.Абрашкевич, М.С.Касчиев, И.В.Лузгин. Препринт ОИЯИ Р11-88-744, Дубна, 1988.
36. А.Г.Абрашкевич и др. Препринт ОИЯИ Р11-88-745, Дубна, 1988.
37. D.L.Miller and A.F.Starace, J.Phys. B 13, L525 (1980).
38. B.L.Christensen-Dalsgaard, Phys.Rev. A 29, 470 (1984).
39. Ф.И.Морс и Г.Фешбах. Методы теоретической физики. Т. 2 (ИЛ, Моск-ква, 1956).
40. C.D.Lin, Phys. Rev. A 10, 1986 (1974).
41. M.I.Haftel, V.B.Mandelzweig, Ann. Phys., 150, 48 (1983).
42. А.Г.Абрашкевич и др. Препринт ОИЯИ Р4-88-746, Дубна, 1988.
43. J.W.Cooper, U.Fano and F.Prats, Phys.Rev.Lett. 10, 518 (1963).
44. M.J.Conneely and L.Lipsky, J.Phys. B 11, 4195 (1978).
45. D.R.Herrick and O.Sinanoglu, Phys.Rev. A 11, 97 (1975).
46. C.D.Lin, Phys. Rev. A29, 1019 (1984).
47. J.M.Feagin and J.S.Briggs, Phys. Rev. A 37, 4599 (1988).
48. S.I.Nikitin, V.N.Ostrovsky, J.Phys. B. 11, 1681 (1978).
49. D.H.Oza, Phys. Rev. A 33, 824 (1986).
50. A.Macias, F.Martin, A.Riera and M.Yanez, Phys. Rev. A 36, 4187 (1987).
51. O.Robaux, J.Phys.B 20, 2347 (1987).
52. C.G.Вас, Phys. Rev. A 38, 591 (1988).
53. Y.K.Но, Phys. Rev. A 23, 2137 (1981).
54. С.И.Никитин, В.Н.Островский. В кн.: Проблемы теоретической физики. III. (Ленинград, изд-во ЛГУ, 1988), с. 64-89.
55. М.В.Кадоцтев, С.И.Виницкий, J.Phys. B20, 5723 (1987).
56. С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев. ЭЧАЯ 13, 556 (1982).
57. C.D.Lin, Phys. Rev. A 14, 30 (1976).
58. A.K.Bhatia and A.Temkin, Phys. Rev. A 11, 2018 (1975).
59. Y.K.Но, A.K.Bhatia and A.Temkin, Phys. Rev. A19, 1423 (1977).
60. A.Macias and A.Riera, Phys. Lett. A 119, 28 (1986).
61. A.Taylor and P.G.Burke, Proc. Phys. Soc. Lond. 92, 336 (1967); J.Macek and P.G.Burke, ibid. 92, 351 (1967).
62. M.P.Ajmera and K.T.Chung, Phys. Rev. A 10, 1013 (1974).
63. J.J.Wendoloski and W.P.Reinhardt, Phys.Rev. A 17, 195 (1978).

64. A. Macias and A. Riera, *Europhys. Lett.* 2, 351 (1986).
65. B.L. Christensen - Dalsgaard, *Phys. Rev. A* 29, 2242 (1984).
66. J.W. McGowan et al, *Phys. Rev. Lett.* 15, 917 (1965); *ibid.* 22, 1165 (1969); *ibid.* 21, 719 (1969); *Phys. Rev. Lett.* 132 (1969).
67. L. Senche and P.D. Burrow, *Phys. Rev. Lett.* 29, 1639 (1972).
68. P.G. Burke and L.D. McVicar, *Proc. Phys. Soc. Lond.* 86, 989 (1965).
69. L. Lipsky and M.J. Conneely, *Phys. Rev. A* 14, 2193 (1976).
70. A.K. Ehatia and A. Temkin, *Phys. Rev. A* 29, 1895 (1984).
71. В.Ф. Братцев. Докл. АН СССР 160, 570 (1965).
72. С.И. Виницкий и др. Препринт ОИЯИ Р4-88-532; Р2-89-228; Р4-89-268, Дунаев, 1988.
73. L.I. Ponomarev, G. Fiorentini, *Muon Catalyzed Fusion* 1,3 (1987).
74. L.I. Ponomarev, *Atomic Physics.* 10, 197 (1987).
75. С.С. Герштейн, В.Д. Кривченков. *ЖЭТФ* 40, 1491 (1961).

Рукопись поступила в издательский отдел  
13 июня 1989 года.

Абрашкевич А.Г. и др.

P4-89-425

Исследование дважды возбужденных состояний  $H^-$  и He в многоканальном гиперсферическом адиабатическом подходе

В рамках многоканального гиперсферического адиабатического (HSA) подхода исследованы дважды возбужденные состояния (DES)  $H^-$  и He. Численно изучено влияние угловых и радиальных корреляций на скорость сходимости значений термов и матричных элементов радиальной связи. Для классификации DES использована схема, базирующаяся на молекулярной классификации состояний HSA-базиса. Приведены результаты многоканальных расчетов  $^1S^0$  и  $^1P^0$  DES  $H^-$  и He, сходящихся ко второму порогу. Выполнено сравнение полученных результатов с другими расчетами и экспериментом. Обсуждается область применимости адиабатического приближения.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1989

Перевод Г.Г.Сандуковской

Abrashkevich A.G. et al.

P4-89-425

Study of Doubly Excited States of  $H^-$  and He in the Coupled-Channel Hyperspherical Adiabatic Approach

Doubly excited states (DES) of  $H^-$  and He are investigated within the coupled-channel hyperspherical adiabatic (HSA) approach. Influence of the angular and radial electron correlations on the rate of convergence of the values of the potential curves and matrix elements of radial coupling is studied numerically. The scheme based on molecular classification of the HSA basis states is used for the classification of DES. The results of the multichannel calculations of  $^1S^0$  and  $^1P^0$  DES of  $H^-$  and He below the second threshold are presented. The obtained results are compared with other calculations and experiment. The region of applicability of the adiabatic approximation is discussed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1989

24 коп.

**Редактор Б.Б. Колесова. Макет Т.Е. Попеко.**

**Подписано в печать 21.06.89.**

**Формат 60x90/16. Офсетная печать. Уч.-изд. листов 1,65.**

**Тираж 425. Заказ 42219.**

**Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.  
Дубна Московской области.**