

Удаан $M^- + He$ мөргөлдөөний үед электроны корреляц тооцох асуудал

Х. Цоохүү, Н. Цогбадрах

Квант системийн хооронд явагдах удаан мөргөлдөөнийг илэрхийлэх үндсэн аргын нэг нь адиабат ойролцоолол юм. Энэ ойролцооллыг квант механикт Борн-Оппенгеймер нар оруулсан ба анх молекулын спектр бодоход хэрэглэжээ. Сүүлийн жилүүдэд нэг электронт атом, ионтой хүнд бөөм мөргөлдөх бодлогыг адиабат элөөлөлд бодох арга эрчимтэй хөгжиж байна [1,2]. Энэ нь Кулоны хоёр төвийн үсгэх оронд хөдөлж байгаа нэг электроны бодлого сферидналь координатын системд хувьсагчдаараа салж тоон аргаар бодох боломжтой болдогт оршино. Удаан мөргөлдөөнийг адиабат ойролцоололд илэрхийлэхдээ эхлээд электроны термийг $E(R)$ үнд төвүүдийн хоорондох зайнаас хамааруулж олох ёстой.

Адиабат ойролцооллыг сөрөг мион, адрон хоёр буюу түүнээс олон электронт томтай мөргөлдөх тохиолдолд өргөтгөх нь практик ач холбогдолтой байдаг. Энэ тохиолдолд Шредингерийн тэгшитгэл хувьсагчдаараа салахгүй. Иймд оөр арга эрхийлэх шаардлагатай.

Сөрөг M^- бөөм He атомтай мөргөлдөх үеийн электроны термийг өмнө [3,4,5] ажлуудад янз бүрийн ойролцоололд авч үзсэн байна. Үүний дүнд харимхай ($M^- + He$) ба харимхай бус ($M^- + He^+$) сувгуудын электроны терм $R = R_0$ цэгт огтолцдог болохыг үзүүлжээ. Энэ нь $R < R_0$ мужид $M^- He$ квазимолекул алндаа иончлогдох адиабат иончлол) боломжтой гэсэн үг.

Дээрх ажлуудад гелийн атомын электроны корреляцийг тооцоогүй. Үүнийг тооцвол $M^- + He$, $M^- + He^+$ сувгууд дахь электроны терм огтолцохгүй бус уу гэсэн асуудал тавигдана. Энэ нь электроны корреляц тооцоход устөрөгчийн сөрөг ион (H^-) тогтвортой систем болдогтой холбоотой. $M^- + He$ системд төвүүдийн хоорондох зайг $R = 0$ болгоход устөрөгчийн сөрөг ион ($Z_1 + Z_2 = -1 + 2 = 1$) болох бөгөөд энэ нь удаан M^- бөөм He атомд хичнээн ч ойртож очсон атом иончлогдохгүй гэсэнтэй утга ижил юм. Тэгэхээр $M^- + He$, $M^- + He^+$ системд харгалзах электроны термүүд нэг бол огт огтолцохгүй эсвэл хоёр буюу түүнээс олон удаа огтолцоно гэсэн үг юм.

Энэ асуудлыг тодруулахын тулд $R \rightarrow \infty$, $R \rightarrow 0$ хоёр асимптотикт He ба H^- ионы энерги рүү харгалзан нийлдэг терм өгдөг туршилт функц сонгон авч вариац

арга хэрэглэх нь төхиромжтой. Энэ зорилгоор $M^- + He$ системийн долгионы функцийг

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = Ne^{-\alpha(r_1+r_2)}[1 + \beta r_{12} + \gamma(r_1 - r_2)^2] \quad (1)$$

хэлбэртэй сонгон авсан. Үүнд

$$N = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{\alpha^6} + \frac{35\beta}{8\alpha^7} + \frac{6\beta^2}{\alpha^8} + \gamma \left(\frac{3}{\alpha^8} + \frac{77\beta}{8\alpha^9} \right) + \frac{9\gamma^2}{\alpha^{10}} \right)^{-1/2} \quad (2)$$

нормчлолын үржигдэхүүн ба α, β, γ параметрууд төвүүдийн хоорондох зай R -аас хамаарна. (1) функц бол $e^- + He$ мөргөлдөөний үед электроны корреляц тооцдог Стюарт-Веберийн функцтэй хэлбэрийн хувьд төсөөтэй. Функцийн нийм сонголтон $He + M^-$ системийн энергийн функциональ:

$$\begin{aligned} \epsilon_{am}(\alpha, \beta, \gamma) + 2N^2 \{ & S_{00}(R) + 2\beta J_{00}(R) + \beta^2 K(R) + \\ & + 2\gamma [S_{20}(R) + S_{02}(R) - 2S_{11}(R) + \beta(J_{20}(R) + J_{02}(R) - 2J_{11}(R))] + \\ & + \gamma^2 [S_{40}(R) - 4S_{31}(R) + 6S_{22}(R) - 4S_{13}(R) + S_{04}(R)] \} \end{aligned} \quad (3)$$

болно. Үүнд:

$$S_{nm}(R) = \int \frac{r_1^n r_2^m}{|\vec{R} - \vec{r}_1|} e^{-2\alpha(r_1+r_2)} dV, \quad (4)$$

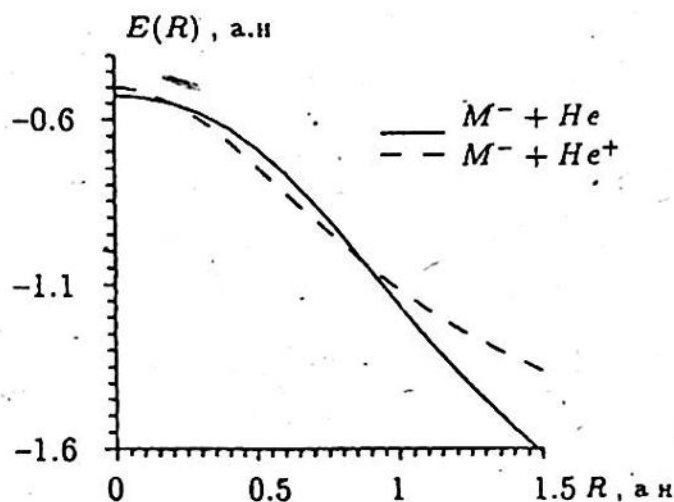
$$J_{nm}(R) = \int \frac{r_{12} r_1^n r_2^m}{|\vec{R} - \vec{r}_1|} e^{-2\alpha(r_1+r_2)} dV, \quad (5)$$

$$K(R) = \int \frac{r_{12}^2}{|\vec{R} - \vec{r}_1|} e^{-2\alpha(r_1+r_2)} dV \quad (6)$$

$\epsilon(\alpha, \beta, \gamma)$ нь гелийн атомын энерги. Бид (4)-(6) интегралуудыг аналитик хэлбэртэй гаргаж авсан. Энэ илэрхийлэл урт учраас бичсэнгүй.

Тооцооны үр дүнг таблиц, графикаар үзүүлэв. Үүнд эхний баганад $He(1s) + M^-$, хоёр дахь баганад $He^+(1s) + M^-$ системийн электроны термийг үзүүлсэн. Гурав дахь баганад Берсукерийн функц ашиглаж $He^+(1s) + M^-$ системийн хувьд бодсон үр дүнг харуулав [3].

Зураг, таблицаас үзэхэд термүүд хоёр удаа огтолцдог болох нь харагдаж байна. Огтолцлын хоёр дахь цэг гарч ирсэн явдал нь $M^- + He$ мөргөлдөөнийг бодоход зарим өөрчлөлт оруулна. Энэ асуудлыг тусад нь авч үзэх болно.



Зур.1. Электроны корреляц тооцсон үеийн $M^- - He(1s^2)$ системийн адиабат терм. Тасархай шугамаар $M^- - He^+(1s)$ системийн адиабат термийг үзүүлсэн.

Таблиц 1.

R, а.у.	$He + M^-$	$He^+ + M^-$	Берсукер
0.1	0.5314	0.5123	0.5062
0.2	0.5497	0.5466	0.5240
0.3	0.5803	0.5995	0.5544
0.4	0.6260	0.6669	0.5987
0.5	0.6874	0.7435	0.6593
0.6	0.7644	0.8241	0.7345
0.7	0.8551	0.9041	0.8185
0.8	0.9554	0.9807	0.9041
0.9	1.0610	1.0521	0.9862

Дүгнэлт

1. Сөрөг цэнэгтэй удаан бөөм гелийн атомд ойртох үеийн термийг электронуудын корреляц тооцож, вариаци аргын хүрээнд бодох аргыг боловсрууллаа.
2. Корреляц тооцоход, өмнөх судлаачдын аргаж авсан үр дүнгээс ялгаатай нь харимхай ба иончлолын сувгуудад харгалзах термүүд хоёр удаа огтолцдог болохыг үзүүлэв.

Electronic Correlation in Slow Collisions of Mesons with Helium Atoms

Kh. Tsookhuu, N. Tsogbadrakh

An adiabatic electronic wave function for helium atoms depending on distance between the heavy particles (the negative meson and the target nuclear) is constructed. Both the radial and angle correlations are included in the wave function and the adiabatic electronic term for the $He(1s^2) + M^-$ system is calculated. It is shown that the adiabatic electronic term for the elastic ($M^- + He(1s^2)$) and ionization ($M^- + He^+(1s)$) channels cross twice at the distance $R_1 = 0.88a_0$ and $R_2 = 0.215a_0$ between heavy particles. A possible corrections to the theory for ionization of atoms by slow meson impact, due to the second crossing point (R_2), are discussed.

АШИГЛАСАН НОМ, ЗОХИОЛ

1. I. Shimamura, *Phys. Rev. A* 46, 3776(1994).
2. T. Janlav, R. Rinchinbazar, and Kh. Tsookhuu, "Numerical solution of two-center problem with charge: $Z_1 = -1, Z_2 = 2$ and neutral mesic helium" Proceedings of Intern. Conf. on Programming and Mathematical Methods for Solving Physical Problems, JINR Dubna, 1993. p. 13-19.
3. И.Б. Берсукер, Г.Н. Горбатина, *ЯФ.Т.* 27, (1978)1273.
4. J.E. Russel, *Phys. Rev. A* 1, (1970), vol.1, 721.
5. R. Ahlrichs, O. Dumbrajs, H. G. Schlaile, *Z. Phys.* A306 (1982)297.