

МАЛОАТОМНЫЕ КЛАСТЕРЫ ГЕЛИЯ И НЕОНА ПРИ НИЗКИХ ЭНЕРГИЯХ

Е.А. Колганова, А.А. Коробицин, О.П. Клименко, Д.И. Шалапинин

Объединенный институт ядерных исследований (г. Дубна)

Государственный университет «Дубна» (г. Дубна)

kea@theor.jinr.ru

В докладе обсуждаются связанные состояния двух- и трехатомных кластеров, состоящих из атомов He и Ne. Дается обзор экспериментальных и теоретических результатов, обсуждается возможность возникновения ефимовских состояний в рассматриваемых тримерах. Исследованиях трехатомных кластеров проводятся в рамках уравнений Фаддеева в конфигурационном пространстве.

Ван-дер-ваальсовские кластеры привлекают значительный интерес в последние десятилетия, поскольку их изучение помогает понять эволюцию свойств материалов от микроскопического уровня до объёмного вещества. Теоретические оценки спектров многоатомных молекул и кластеров в сравнении с экспериментом также дают большой объём информации о молекулярных свойствах систем. К простейшим квантово-механическим системам относятся ван-дер-ваальсовские двух- и трехатомные кластеры инертных газов, которые представляют собой идеальную возможность исследования слабосвязанных состояний благодаря своей химической инертности. Экспериментальные исследования димеров, тримеров и более крупных кластеров различных атомов, проводимые с помощью дифракционных экспериментов [1, 2] и спектроскопии высокого разрешения [3, 4], обеспечивают критически

важные ориентиры для уточнения как поверхностей потенциальной энергии, так и проверки методов квантового моделирования [5] и совершенствования подходов к машинному обучению [6]. Экспериментальные исследования стабильности Бозе-Эйнштейновских конденсатов позволяют пронаблюдать теоретически предсказанный эффект Ефимова, связанный с ростом числа связанных состояний при ослаблении эффективного парного взаимодействия между компонентами системы [7].

В нашей работе рассмотрены двух- и трехатомные кластеры, состоящий из атомов гелия и неона. Волновые функции и спектры двухатомных систем He_2 , HeNe , Ne_2 , вычислены используя нерелятивистское уравнение Шредингера с различными реалистическими межатомными потенциалами вандер-ваальсовского типа. Слабое взаимодействие Ван-дер-Ваальса и малая энергия связи этих димеров исключительно чувствительны к тонким квантовым эффектам, что делает их ценными тестовыми системами для теоретических моделей и вычислительных методов. Так, все используемые потенциальные модели дают единственное околопороговое состояние димера ${}^4\text{He}_2$ с энергией связи 1,62 мК, что соответствует недавно полученному экспериментальному значению $1,76 \pm 0,15$ мК [8]. Такая слабая связь позволяет двум атомам гелия находиться в связанном состоянии только с нулевым угловым моментом. Возбужденные же уровни (вращательные или колебательные) у этой системы отсутствуют. Поскольку масса атома ${}^3\text{He}$ на четверть меньше массы атома ${}^4\text{He}$, реалистические Не-Не-потенциалы не поддерживают связанных состояний ни у одной из двухатомных систем ${}^3\text{He}-{}^3\text{He}$ и ${}^3\text{He}-{}^4\text{He}$.

В каждом из димеров ${}^4\text{He}{}^{20}\text{Ne}$ и ${}^4\text{He}{}^{22}\text{Ne}$ найдено три состояния с угловым моментом $J = 0, 1$ и 2 с энергиями, приведенными в таблице в сравнении с недавними экспериментальными данными из работы [9]. Теоретическое значение для энергии связи ${}^4\text{He}{}^{20}\text{Ne}$ хорошо согласуется с экспериментальным, для изотопно-замещенного димера ${}^4\text{He}{}^{22}\text{Ne}$ энергия связи отличается, что, по-видимому, связано с большой статистической погрешностью измерения. В системе ${}^{20}\text{Ne}_2$ также были найдены три состояния с энергиями 24,2 К, 4,4 К и 0,02 К, которые хорошо согласуются с экспериментом [10].

Энергии связи $|E_J|$ димеров ${}^4\text{He}{}^{20}\text{Ne}$ и ${}^4\text{He}{}^{22}\text{Ne}$ в Кельвинах

$ E_J $	${}^4\text{He}{}^{20}\text{Ne}$ расчет	${}^4\text{He}{}^{20}\text{Ne}$ эксп.[9]	${}^4\text{He}{}^{22}\text{Ne}$ расчет	${}^4\text{He}{}^{22}\text{Ne}$ эксп.[9]
$ E_{J=0} $	3,7138	$3,71 \pm 0,15$	3,7878	$4,6 \pm 0,8$
$ E_{J=1} $	2,6927	—	2,7762	—
$ E_{J=2} $	0,7647	—	0,8605	—

Связанные состояния трехатомных систем He_3 , He_2Ne , Ne_3 исследованы в формализме Фаддеева. Малость энергии связи димера гелия позволяет ожидать наличия в тримере гелия возбужденного состояния ефимовского типа и такое состояние было теоретически предсказано в наших расчетах [11], однако, проведенные исследования трех-частичных систем He_2Ne и Ne_3 не позволяют ожидать наличия ефимовских связанных состояний в этих системах, но возможны ефимовские резонансы в непрерывном спектре.

1. Schöllkopf W., Toennies J.P. Nondestructive mass selection of small van der Waals clusters // Science. – 1994. – V. 266. – P. 1345-1348.
2. Kunitski M., Guan Q., Maschkiwitz H., Hahnenbruch J., Eckart S., Zeller S., Kalinin A., Schoeffler M., Schmidt L.Ph.H., Jahnke T., Blume D., Doerner R. Ultrafast manipulation of the weakly bound helium dimer // Nature Physics. – 2021. – V. 17. – P. 174-178.
3. Luo F., McBane G.C., Kim G., Giese C. F., Gentry W. R. The weakest bond: Experimental observation of helium dimer // J. Chem. Phys. – 1993. – V. 98. – P. 9687.
4. Arunan E. Molecule matters van der waals molecules: 2. noble gas clusters are london molecules! // Resonance. – 2023. – V.14. – P. 1210–1222.
5. Колганова Е.А., Мотовилов А.К., Зандхас В. Ультрахолодные столкновения в системе трех атомов гелия // ЭЧАЯ. – 2009. – Т. 40. – С. 396-456.

6. Perepu P.K., Mishra B.K., Panda A.N. Prediction of interaction energy for rare gas dimers using machine learning approaches. // J. Chem. Sci. – 2023. – V. 135. – P. 12-21.
7. Ferlaino F., Grimm R. Trend: Forty years of Efimov physics: How a bizarre prediction turned into a hot topic // Physics. – 2010. – V. 3. – P. 9-18.
8. Zeller S. et al. Imaging the He₂ quantum halo state using a free electron laser // Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. – 2016. – V.113. – P.14651– 14655.
9. Kurse J., Schroeder J., Blume D., Doerner R., Kunitski M.. Imaging the Rovibrational Ground State of the Helium–Neon Dimers // J. Phys. Chem. Lett. – 2025. – V.16. – P.3225-3231.
10. Wuest A., Merkt F. Determination of the interaction potential of the ground electronic state of Ne₂ by high-resolution vacuum ultraviolet laser spectroscopy// J. Chem. Phys. – 2003. – V.118. – P.8807-8812.
11. Korobitsin A.A, Kolganova E.A. The Properties of the Symmetric and Asymmetric Helium Three-Atomic Systems //Phys. Part. Nucl. - 2023. - V.54. - P.1029-1032