



ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

A 16

P4-89-426

А.Г.Абрашкевич<sup>1</sup>, Д.Г.Абрашкевич<sup>1</sup>,  
С.И.Виницкий, М.И.Гайсак<sup>2</sup>, В.И.Лендьел<sup>1</sup>,  
И.В.Пузынин

РАСЧЕТ ДИПОЛЬНЫХ СИЛ ОСЦИЛЛЯТОРОВ  
ДЛЯ ДИСКРЕТНЫХ  $1s^0-1p^0$  ПЕРЕХОД В ГЕЛИИ  
В МНОГОКАНАЛЬНОМ ГИПЕРСФЕРИЧЕСКОМ  
АДИАБАТИЧЕСКОМ ПОДХОДЕ

Направлено в журнал "Physics Letters A"

<sup>1</sup>Ужгородский государственный университет  
<sup>2</sup>Ужгородское отделение ИЯИ АН УССР

I. На протяжении последних десятилетий изучение гелиеподобных систем является предметом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований. Изучению динамики коррелированного движения двух электронов в атоме, расчетам и классификации однократно и дважды возбужденных состояний двухэлектронных систем, исследованию процессов рассеяния электронов на одноэлектронных атомах и ионах, а также процессов фотовозбуждения, фотоионизации и двухэлектронной ионизации в атомах и ионах посвящено большое число работ (см. обзоры [1-13]). Получение надежных теоретических и экспериментальных данных для перечисленных выше процессов необходимо в лазерной спектроскопии, квантовой электронике, физике плазмы, квантовой химии, астрофизике и др. В настоящее время для вычисления физических характеристик атомных процессов имеется ряд приближенных подходов, среди которых наиболее известными являются: метод сильной связи каналов [14,15],  $R$ -матричный метод [4], матричный вариационный метод [5], метод неложения конфигураций [16], многоконфигурационный метод Хартри-Фоке [17], метод вращения комплексных координат [10]. С помощью этих подходов выполнены расчеты спектров гелиеподобных систем (см., напр., [1-10,16-30]). Наиболее точные результаты получены вариационным методом [18-25]. Результаты вычислений средних значений различных операторов и сил осцилляторов - интегральных спектральных характеристик, выявили зависимость этих величин от аналитической структуры волновых функций. Использование разных систем координат, различный выбор пробных функций и способы учета особых точек уравнения Шредингера [35-37] приводят к заметным отличиям в интегральных характеристиках, хотя сами значения энергии при этом практически не меняются [17-34]. Другими словами, приближенные волновые функции, обеспечивающие "точные" значения энергии, существенным образом отличаются своим поведением в окрестности особых точек и на асимптотике. Таким образом, для получения аккуратных волновых функций необходим тщательный учет особенностей уравнения Шредингера [35-37]. Недавние прецизионные расчеты энергии основного и однократно возбужденных состояний атома гелия в гиперсферической параметризации [38-41], выполненные в рамках различных реализаций этого подхода, продемонстрировали реальные возможности метода. Анализ средних значений различных операторов, проведенный в работе [41], показал, что приближенная волновая функция, полученная в этом подходе с учетом тройной и парных точек соударения частиц, равномерно сходится к точному решению в каждой точке. Отметим, что вариационная волновая функция, полученная минимизацией функционала полной энергии, не обладает, вообще говоря, этим свойством. Использование гиперсферической параметризации имеет еще одно важное достоинство: в рамках адиабатического под-

да она позволяет понять динамику коррелированного движения электронов в атоме и описать спектры одно- и дважды возбужденных состояний (DES) гелиеподобных систем. Впервые гиперсферический адиабатический (HSA) подход был применен Я.Мачеком [42] для вычисления и интерпретации спектров DES гелия. В дальнейшем HSA-подход активно применялся для решения широкого круга задач атомной физики (см. обзоры [11,13] и цитируемую там литературу). При этом, как правило, использовалось адиабатическое приближение, в котором пренебрегается неадиабатической связью каналов в системе радиальных уравнений. Это приближение позволяет качественно описать коррелированное движение электронов в атоме и в ряде случаев дает хорошие результаты, однако в целом для достижения требуемой точности, принятой в атомных расчетах ( $\leq 10^{-4}$  а.е.), необходим выход за рамки адиабатического приближения [43,44]. Результаты численных исследований, выполненных в работах [45-48], указывают на высокую скорость сходимости HSA-разложения для основного [45,46] и для DES [47-48] двухэлектронных атомов. Это обстоятельство позволяет обеспечить требуемую точность вычислений ( $\sim 10^{-4}$  а.е.) при использовании небольшого числа радиальных уравнений. Использование барцентрических координат [49] в рамках HSA-подхода [50] позволило точно учесть изотопические поправки, связанные с конечной массой ядра.

Существенно меньше данных имеется по расчетам интегральных характеристик в HSA-подходе. В работах [51-53] представлены результаты расчетов дипольных сил осцилляторов и сечений фотоионизации He и  $H^+$ , выполненных в адиабатическом приближении. Сравнение с результатами аналогичных расчетов другими методами [17,25,31-33] показывает, что в целом адиабатические расчеты [52] хорошо согласуются с лучшими вариационными оценками энергии и сил осцилляторов, но уступают им в точности. Представляет интерес исследовать также роль неадиабатических поправок при вычислении спектральных характеристик гелиеподобных систем в HSA-подходе. В данной работе исследуются энергии однократно возбужденных состояний и силы осцилляторов  $^1S^e-^1P^o$  дискретных переходов в He в многоканальном приближении HSA-подхода.

2. Уравнение Шредингера для двухэлектронного атома с зарядом  $Z$  в гиперсферических координатах  $\{R, \alpha, \hat{z}_1, \hat{z}_2\}$

$R = (r_1^2 + r_2^2)^{1/2}$ ,  $\alpha = \tan^{-1}(r_2/r_1)$ ,  $\hat{z}_i = \{\theta_i, \varphi_i\}$ ,  $i=1,2$ ,  
имеет вид ( $e = \hbar = m_e = 1$ )

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

где

$$H = -\frac{1}{R^5} \frac{\partial}{\partial R} R^5 \frac{\partial}{\partial R} + T(R) + R^{-2} V(\alpha, r_{12}), \quad (2)$$

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

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

Здесь  $\vec{L}_i$  есть оператор орбитального момента  $i$ -го электрона,  $\Omega = \{\alpha, \hat{z}_1, \hat{z}_2\}$  и  $\vartheta_{12} = \cos^{-1}(\vec{z}_1 \cdot \vec{z}_2)$ . HSA-базис определяется как полный ортонормированный набор решений  $\{\Phi_\mu(\Omega; R)\}_{\mu=1}^\infty \in L^2(S^5)$  задачи

$$[T(R) + R^{-2}V(\alpha, \vartheta_{12})]\Phi_\mu(\Omega; R) = R^2 U_\mu(R) \Phi_\mu(\Omega; R). \quad (5)$$

Собственные значения (термы)  $U_\mu(R)$  зависят от  $R$  как от параметра при фиксированном наборе квантовых чисел  $\mu$ . Парциальный анализ в представлении полного момента позволяет отделить четыре угловые переменные  $\hat{z}_1, \hat{z}_2$ :

$$\Phi_\mu(\Omega; R) = \sin^{-1} \alpha \cos^{-1} \alpha \sum_{l_1 l_2} g_{l_1 l_2}^{(\mu)}(\alpha; R) Y_{l_1 l_2}^{LM}(\hat{z}_1, \hat{z}_2), \quad (6)$$

где  $Y_{l_1 l_2}^{LM}(\hat{z}_1, \hat{z}_2) = \sum_{m_1 m_2} C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{LM} Y_{l_1 m_1}(\hat{z}_1) Y_{l_2 m_2}(\hat{z}_2)$ . Здесь  $L$  и  $M$  - полный орбитальный момент системы и его проекция на ось  $Z$  лабораторной системы координат,  $C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{LM}$  - коэффициент Клебша-Гордана,  $Y_{l_i m_i}(\hat{z}_i)$ ,  $i=1, 2$ , - сферические гармоники.

Подстановка (6) в уравнение (5) и усреднение по  $Y_{l_1 l_2}^{LM}(\hat{z}_1, \hat{z}_2)$  приводят к бесконечной системе обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\left[ \frac{d^2}{d\alpha^2} - \frac{l_1(l_1+1)}{\cos^2 \alpha} - \frac{l_2(l_2+1)}{\sin^2 \alpha} + R^2 U_\mu(R) \right] g_{l_1 l_2}^{(\mu)}(\alpha; R) + R \sum_{l_1' l_2'} \langle Y_{l_1' l_2'}^{LM}(\hat{z}_1, \hat{z}_2) | V(\alpha, \vartheta_{12}) | Y_{l_1 l_2}^{LM}(\hat{z}_1, \hat{z}_2) \rangle g_{l_1' l_2'}^{(\mu)}(\alpha; R) = 0. \quad (7)$$

Антисимметрия функции  $\Phi_\mu(\Omega; R)$  обеспечивается граничными условиями на функции  $g_{l_1 l_2}^{(\mu)}(\alpha; R)$  в точке  $\alpha = \pi/4$  [42].

HSA-разложение полной двухэлектронной волновой функции  $\Psi$  имеет вид

$$\Psi(R, \Omega) = R^{-5/2} \sum_\mu F_\mu(R) \Phi_\mu(\Omega; R). \quad (8)$$

Подстановка первых  $N$  членов разложения (8) в уравнение (I) и усреднение по базисным функциям  $\Phi_\mu(\Omega; R)$  приводит к системе

$N$  связанных обыкновенных дифференциальных уравнений для радиальных функций  $\vec{F}(R) = \{F_\mu(R)\}_{\mu=1}^N$ :

$$\left[ -\frac{d^2}{dR^2} \hat{I} + \hat{V}(R) - 2E \hat{I} \right] \vec{F}(R) + \hat{Q}(R) \frac{d\vec{F}(R)}{dR} + \frac{d}{dR} [\hat{Q}(R) \vec{F}(R)] = 0 \quad (9)$$

с граничными условиями

$$\vec{F}(0) = \vec{F}(\infty) = 0. \quad (10)$$

Здесь  $\hat{I}$ ,  $\hat{V}$  и  $\hat{Q}$  - квадратные  $N \times N$  матрицы, имеющие вид:  $I_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}$ ,

$$V_{\mu\nu}(R) = -\frac{1}{4R^2} \delta_{\mu\nu} + U_\mu(R) \delta_{\mu\nu} + \left\langle \frac{d\Phi_\mu(\Omega; R)}{dR} \middle| \frac{d\Phi_\nu(\Omega; R)}{dR} \right\rangle,$$

$$Q_{\mu\nu}(R) = -Q_{\nu\mu}(R) = -\left\langle \Phi_\mu(\Omega; R) \middle| \frac{d\Phi_\nu(\Omega; R)}{dR} \right\rangle. \quad (11)$$

Скобки  $\langle \cdot | \cdot \rangle$  означают интегрирование по переменной  $\alpha$  и суммирование по всем парам  $(l_1, l_2)$ . В практических расчетах полубесконечный интервал по переменной  $R$   $[0, \infty)$  заменяется на конечный  $R \in [0, R_{\max}]$ .

3. Решение спектральных задач (5) и (9) осуществлялось методами конечных разностей и конечных элементов соответственно. Построение сеток, аппроксимация с необходимой точностью и решение соответствующих алгебраических задач на собственные значения осуществлялись алгоритмами и программами, разработанными в [54, 55].

В данной работе расчет термов  $U_\mu(R)$  и отвечающих им собственных функций  $g_{l_1 l_2}^{(\mu)}(\alpha; R)$  был выполнен в следующем приближении: для  $1s^e$  состояний He  $l_{\max} = \max(l_1, l_2) = 8$  (9 уравнений в системе (7)) и число узлов конечно-разностной сетки на интервале  $\alpha \in [0, \pi/4]$   $n_\alpha = 500$ , а для  $1p^o$  состояний He -  $l_{\max} = 4$  (8 уравнений системы (7)) и  $n_\alpha = 720$ . В каждой точке по  $R$  одновременно вычислялись первые шесть (для  $1s^e$ ) и четыре (для  $1p^o$ ) термов  $U_\mu(R)$  и функций  $g_{l_1 l_2}^{(\mu)}(\alpha; R)$ . Расчеты проводились на сетке узлов по гиперрадиусу  $R$ : 0.1(0.1)15(0.2)20(0.25)30(0.5)40(1)50(2)60 - для  $1s^e$  и 0.1(0.1)12(0.2)20(0.25)40(1)50(2)60 - для  $1p^o$  состояний He. Производные  $dg_{l_1 l_2}^{(\mu)}(\alpha; R)/dR$  вычислялись по конечно-разностным формулам четвертого порядка точности. Потенциалы  $V_{\mu\nu}(R)$  и  $Q_{\mu\nu}(R)$  интерполировались с помощью кубической сплайн-интерполяции. Для решения задачи Штурма-Лиувилля (9)-(10) мы использовали изопараметрические лагранжевы элементы четвертого порядка, обеспечивающие точность  $O(h^8)$  относительно собственных чисел и  $O(h^5)$  относительно собственных функций (здесь  $h$  - шаг конечно-элементной сетки). В результате численных экспериментов выбраны следующие значения параметров вычислительной схемы: значение  $R_{\max} = 40$  и число элементов  $n_R = 100$  для основного состояния He и  $R_{\max} = 60$  и  $n_R = 150$  для всех остальных состояний. В таблице I представлены результаты вычислений уровней энергии  $1s^e$  ( $n=1, 2, 3$ ) и  $1p^o$  ( $m=2, 3, 4$ ) состояний He в зависимости от числа радиальных уравнений  $N$ . Для сравнения приведены также результаты аналогичных расчетов другими методами. Значение энергии основного состояния  $E_0 = -2,90370 \pm 0,0001$  а.е., вычисленное в данной работе в шестиканальном HSA-приближении с учетом 9 парциальных волн ( $l_{\max} = 8$ ), хорошо согласуется с результатами других

Таблица I. Значения энергии - E (в а.е.)  $1S^e$   $1s_{n\alpha}(n=1,2,3)$  и  $1P^o$   $1s_{m\beta}(m=2,3,4)$  состояний He в зависимости от числа радиальных уравнений N. В расчетах были использованы следующие значения параметров: число конечных элементов  $n_r=100$  и  $R_{\max}=40$  для основного состояния и  $n_r=150$  и  $R_{\max}=60$  для всех остальных состояний

№	$1S^2(1S^e)$	$1S2S(1S^e)$	$1S3S(1S^e)$	$1S2P(1P^o)$	$1S3P(1P^o)$	$1S4P(1P^o)$
1	2.895590	2.140207	2.059262	2.121608	2.054071	2.030571
2	2.898683	2.141884	2.059894	2.122922	2.054556	2.030797
3	2.903651	2.145790	2.060958	2.123231	2.054747	2.030875
4	2.903672	2.145823	2.050976	2.123623	2.054907	2.030953
5	2.903676	2.145880	2.061035			
6	2.903698	2.145946	2.061095			
Дру- гие	2.889125 <sup>a</sup> 2.903382 <sup>b</sup>	2.139455 <sup>a</sup> 2.145937 <sup>b</sup>	2.059050 <sup>a</sup> 2.061260 <sup>b</sup>	2.121460 <sup>a</sup> 2.123781 <sup>b</sup>	2.054055 <sup>a</sup> 2.055125 <sup>b</sup>	2.030575 <sup>a</sup> 2.031059 <sup>b</sup>
рас- четы	2.903724 <sup>c</sup> 2.903433 <sup>d</sup> 2.903033 <sup>e</sup> 2.903535 <sup>f</sup> 2.903724 <sup>g</sup> 2.903694 <sup>h</sup>	2.149974 <sup>c</sup> 2.145909 <sup>d</sup> 2.145873 <sup>e</sup> 2.145935 <sup>f</sup> 2.145974 <sup>g</sup> 2.145974 <sup>h</sup>	2.061272 <sup>c</sup> 2.123801 <sup>d</sup> 2.123748 <sup>e</sup> 2.123826 <sup>f</sup> 2.061272 <sup>g</sup> 2.061272 <sup>h</sup>	2.123843 <sup>c</sup> 2.123801 <sup>d</sup> 2.123748 <sup>e</sup> 2.123826 <sup>f</sup> 2.123843 <sup>g</sup> 2.123840 <sup>h</sup>	2.055146 <sup>c</sup> 2.055146 <sup>g</sup> 2.055145 <sup>h</sup>	2.031070 <sup>c</sup> 2.031070 <sup>g</sup> 2.031069 <sup>h</sup>

<sup>a</sup>Park, Starace, Tan and Lin [52]

<sup>b</sup>Green, Kolchin and Johnson [28]

<sup>c</sup>Schiff, Pekeris and Accad [32]

<sup>d</sup>Devine and Stewart [30]

<sup>e</sup>Fischer [56]

<sup>f</sup>Davis and Chung [33]

<sup>g</sup>Kono and Hattori [25]

<sup>h</sup>Moore [57]

расчетов (см. таблицу I) и уступает по точности лишь прецизионным вариационным расчетам  $E^{\text{var}}=-2,903724$  а.е. [32,25]. Заметим, что учет высших парциальных волн ( $l_{\max}=8$ ) позволяет существенно улучшить значение энергии  $E_0=-2,9032$  а.е., полученное в нашей предыдущей работе [46] также в шестиканальном приближении с учетом 4 парциальных волн ( $l_{\max}=3$ ). В то же время значения энергии основного состояния, вычис-

ленные в данной работе в адиабатическом  $E_0^{\text{ad}}=-2,8956$  а.е. и двухканальном  $E_0^{2C}=-2,8987$  а.е. приближениях, совпадают с результатами работы [46] и хорошо согласуются с адиабатическим расчетом  $E_0^{\text{ad}}=-2,8956$  а.е. Парка и Стэрэйса [58] и двухканальным расчетом  $E_0^{2C}=-2,899$  а.е. Горноса и др. [44], выполненными с учетом 4 парциальных волн. Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что для основного состояния He вклад от высших парциальных волн ( $l_{\max} \gg 4$ ) существен лишь при  $N \gg 3$ . Аналогичное утверждение справедливо также и для однократно возбужденных  $1S^e$  состояний He (см. таблицу I). Четырехканальные расчеты однократно возбужденных  $1P^o$  состояний He с учетом 5 парциальных волн ( $l_{\max}=4$ ) с точностью  $\sim 10^{-4}$  а.е. согласуются с результатами расчетов другими методами (см. таблицу I). Таким образом, анализ полученных результатов позволяет сделать вывод, что выход за рамки адиабатического приближения позволяет использовать в расчетах небольшое число радиальных уравнений для вычисления уровней энергии с точностью  $\sim 10^{-4}$  а.е. Из таблицы I видно, что для  $1S^e$  и  $1P^o$  состояний He определяющим является учет второй оболочки, дающей основной вклад в неадиабатические поправки к значениям энергии в адиабатическом приближении. Отметим, что разность энергий, полученных при учете соответственно одной и двух оболочек, уменьшается с ростом номера уровня. Это означает, что вклад угловых корреляций с увеличением номера уровня уменьшается.

4. Дипольный матричный элемент в "форме длины" для линейно-поляризованного света, падающего вдоль оси Z, имеет вид

$$D_L = \langle \Psi_f | \hat{\epsilon}_z \cdot \sum_{i=1}^Z \vec{r}_i | \Psi_i \rangle = \langle \Psi_f | R(\cos \alpha \cos \theta_2 + \sin \alpha \cos \theta_2) | \Psi_i \rangle, \quad (12)$$

где  $\Psi_i$  и  $\Psi_f$  - волновые функции начального и конечного состояний. Используя для этих функций разложение (8), получаем выражение для  $D_L$  в виде

$$D_L = \sum_{\mu, \mu'} \int_0^\infty dR F_\mu(R) R F_{\mu'}(R) I_{\mu, \mu'}^L(R), \quad (13)$$

где для рассматриваемых в данной работе дискретных  $1S^e-1P^o$  переходов угловой матричный элемент  $1S^e-1P^o$  имеет вид [52]:

$$I_{\mu, \mu'}^L(R) = \sum_{l_1, l_2} 3^{-4/2} (2l_2+1)^{-1/2} (l_2 \parallel C^z \parallel l_2) \cdot \left( \int_0^{\pi/2} d\alpha g_{l_1 l_2}^{(\mu)} \cos \alpha g_{l_1 l_2}^{(\mu')} + \int_0^{\pi/2} d\alpha g_{l_1 l_2}^{(\mu)} \sin \alpha g_{l_1 l_2}^{(\mu')} \right), \quad (14)$$

$$(l_2 \parallel C^z \parallel l_2) = (2l_2+1)^{1/2} C_{l_2 0 l_2}^{20}$$

где

Выражение для дипольного матричного элемента в форме ускорения имеет вид

$$D_A = \langle \Psi_f | \hat{E}_z \cdot \sum_{i=1}^N \frac{z_i \vec{z}_i}{z_i^3} | \Psi_i \rangle = \langle \Psi_f | \frac{z}{R^2} \left[ \frac{\cos \theta_z}{\cos^2 \alpha} - \frac{\cos \theta_z}{\sin^2 \alpha} \right] | \Psi_i \rangle = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi dR F_{\mu\mu'}(R) R^{-2} F_{\mu\mu'}(R) I_{\mu\mu'}^A(R), \quad (15)$$

где для  $1s^e-1P^o$  переходов

$$I_{\mu\mu'}^A(R) = \sum_{l_1 l_2} 3^{-1/2} (2l_1+1)^{1/2} (l_2 \parallel C^1 \parallel l_1) \times \left( \int_0^{2\pi} g_{l_1 l_2}^{(\mu)} \cos^2 \alpha g_{l_1 l_2}^{(\mu')} d\alpha + \int_0^{2\pi} g_{l_1 l_2}^{(\mu)} \sin^2 \alpha g_{l_1 l_2}^{(\mu')} d\alpha \right). \quad (16)$$

Общие выражения для угловых матричных элементов  $I_{\mu\mu'}^A(R)$ , а также выражение для дипольного матричного элемента в форме скорости  $D_V$  приведены в работе [52]. Соответствующие выражения для сил осцилляторов в формах длины, скорости и ускорения имеют вид

$$f_L = 2(E_f - E_i) |D_L|^2, \quad f_V = \frac{2}{(E_f - E_i)} |D_V|^2, \quad f_A = \frac{2}{(E_f - E_i)^3} |D_A|^2, \quad (17)$$

где  $(E_f - E_i) = \omega$  - энергия фотона (в а.е.), в  $E_i$  и  $E_f$  - соответственно энергии начального и конечного состояний.

В данной работе вычислены дипольные силы осцилляторов в формах длины и ускорения для дискретных  $1s^e-1s^e$  ( $n=1,2,3$ ) -  $1s^e-1P^o$  ( $m=2,3,4$ ) переходов в гелии в шестиканальном (для  $1s^e$ ) и четырехканальном (для  $1P^o$  состояний) приближениях NSA-подхода. Силы осцилляторов в форме скорости не вычислялись из-за сложного вида  $D_V$  [52] и необходимости использования численного дифференцирования при расчете угловых интегралов  $I_{\mu\mu'}^A(R)$ , приводящего к потере точности. В таблицах 2-4 приведены значения сил осцилляторов в формах длины  $f_L$  и ускорения  $f_A$  для дискретных переходов в гелии из состояний  $1s^2(1s^e)$ ,  $1s2s(1s^e)$  и  $1s3s(1s^e)$  соответственно, в состоянии  $1s^e$  ( $1P^o$ ),  $m=2,3,4$ , в зависимости от числа радиальных уравнений  $N_i$  и  $N_f$ . Вычисленные в адиабатическом приближении значения  $f_L$  с точностью до нескольких тысяч а.е. воспроизводят адиабатические результаты работы [52] (см. таблицы 2-4). Для значений  $f_A$  согласие несколько хуже, что связано с отличиями в вычисленных адиабатических энергиях и наличием фактора  $(E_f - E_i)^{-3}$  в выражении (17) для  $f_A$ . Мы не будем обсуждать здесь результаты расчетов в адиабатическом приближении - такой анализ выполнен в работе [52]. Перейдем сразу к обсуждению роли неадиабатических поправок для сил осцилляторов. Анализ таблицы 2 показывает, что значения сил осцилляторов сходятся при увеличении числа радиальных уравнений  $N_i$  и  $N_f$  к "точным" значениям сверху, причем, как и для значений энергий, определяющим является вклад второй оболочки. Вычисленные при

Таблица 2. Значения сил осцилляторов в форме длины (ускорения) для переходов  $1s^e(1s^e) - 1s^e(1P^o)$ ,  $m=2,3,4$ , в гелии в зависимости от числа радиальных уравнений  $N_i$  и  $N_f$ . Для сравнения приведены результаты расчетов в NSA-приближении, методом наложения конфигураций и вариационным методом

$N_i$	$N_f$	Методом					
		1	2	3	4		
		$1s^2(1s^e) - 1s2p(1P^o)$					
1	1	0.2893(0.3553) <sup>a</sup>	0.2759(0.3308)	0.2671(0.3453)	0.2671(0.3458)	0.2669(0.3438)	0.2668(0.3443)
2	2	0.2964(0.2597)	0.2831(0.2389)	0.2738(0.2527)	0.2738(0.2532)	0.2736(0.2514)	0.2735(0.2519)
3	3	0.2971(0.2591)	0.2839(0.2384)	0.2745(0.2522)	0.2745(0.2527)	0.2744(0.2509)	0.2742(0.2514)
4	4	0.2997(0.2942)	0.2862(0.2715)	0.2766(0.2853)	0.2766(0.2858)	0.2765(0.2839)	0.2763(0.2844) <sup>b</sup>
		$1s^2(1s^e) - 1s3p(1P^o)$					
1	1	0.0749(0.0905) <sup>c</sup>	0.0722(0.0849)	0.0705(0.0883)	0.0705(0.0884)	0.0704(0.0880)	0.0704(0.0881)
2	2	0.0766(0.0695)	0.0741(0.0646)	0.0724(0.0678)	0.0724(0.0680)	0.0723(0.0676)	0.0723(0.0676)
3	3	0.0762(0.0688)	0.0738(0.0639)	0.0720(0.0671)	0.0720(0.0673)	0.0720(0.0669)	0.0720(0.0669)
4	4	0.0770(0.0768)	0.0746(0.0716)	0.0728(0.0748)	0.0728(0.0749)	0.0728(0.0745)	0.0728(0.0746) <sup>d</sup>
		$1s^2(1s^e) - 1s4p(1P^o)$					
1	1	0.0305(0.0366) <sup>e</sup>	0.0295(0.0344)	0.0288(0.0357)	0.0289(0.0358)	0.0288(0.0356)	0.0288(0.0357)
2	2	0.0311(0.0286)	0.0302(0.0266)	0.0296(0.0279)	0.0296(0.0279)	0.0296(0.0278)	0.0296(0.0278)
3	3	0.0308(0.0281)	0.0300(0.0262)	0.0293(0.0275)	0.0293(0.0275)	0.0293(0.0274)	0.0293(0.0274)
4	4	0.0311(0.0312)	0.0303(0.0292)	0.0297(0.0304)	0.0297(0.0305)	0.0297(0.0303)	0.0297(0.0303) <sup>f</sup>

a - Гиперферрическое адиабатическое приближение [52]; b - 0.291(0.342); c - Метод наложения конфигураций [59]; d - 0.2754(0.2691); вариационный расчет [25]; e - 0.2762; f - Гиперферрическое адиабатическое приближение [52]; g - 0.075(0.086); h - Метод наложения конфигураций [59]; i - 0.0729(0.0705); вариационный расчет [25]; j - 0.0734; k - Гиперферрическое адиабатическое приближение [52]; l - 0.030(0.035); m - Метод наложения конфигураций [59]; n - 0.0296(0.0284); вариационный расчет [25]; o - 0.0299.

Таблица 3. Значения сил осцилляторов в форме длины (ускорения) для переходов  $1s2s(^1S^e) - 1smp(^1P^o)$ ,  $m=2,3,4$ , в гелии в зависимости от числа радиальных уравнений  $N_i$  и  $N_f$ . Для сравнения приведены результаты вычислений в HSA-приближении и вариационным методом

$N_f \backslash N_i$	1	2	3	6
<u><math>1s2s(^1S^e) - 1s2p(^1P^o)</math></u>				
1	0.3249(31.0768) <sup>a</sup>	0.3524(5.3014)	0.4106(7.9088)	0.4228(5.4205)
2	0.2966(3.8582)	0.3242(21.787)	0.3828(4.7509)	0.3951(5.8098)
3	0.2867(1.1418)	0.3144(4.7421)	0.3731(0.0699)	0.3853(0.3744)
4	0.2784(1.4930)	0.3062(5.1377)	0.3650(0.3039)	0.3773(0.8732) <sup>b</sup>
<u><math>1s2s(^1S^e) - 1s3p(^1P^o)</math></u>				
1	0.1804(0.6033) <sup>c</sup>	0.1623(0.2694)	0.1303(0.4118)	0.1230(0.3603)
2	0.1980(0.0547)	0.1790(0.0004)	0.1451(0.0209)	0.1373(0.0120)
3	0.2062(0.2533)	0.1864(0.0572)	0.1518(0.1500)	0.1438(0.1216)
4	0.2122(0.4064)	0.1921(0.1333)	0.1569(0.2471)	0.1488(0.2067) <sup>d</sup>
<u><math>1s2s(^1S^e) - 1s4p(^1P^o)</math></u>				
1	0.0571(0.1652) <sup>e</sup>	0.0528(0.0829)	0.0450(0.1216)	0.0423(0.1053)
2	0.0609(0.0169)	0.0565(0.0002)	0.0486(0.0081)	0.0459(0.0049)
3	0.0619(0.0700)	0.0575(0.0207)	0.0496(0.0458)	0.0469(0.0367)
4	0.0633(0.1189)	0.0589(0.0488)	0.0509(0.0808)	0.0482(0.0675) <sup>f</sup>

a - Гиперсферическое адиабатическое приближение [52]: 0.326(0.926)

b - Вариационный расчет [25]: 0.3764

c - Гиперсферическое адиабатическое приближение [52]: 0.178(0.540)

d - Вариационный расчет [25]: 0.1513

e - Гиперсферическое адиабатическое приближение [52]: 0.056(0.154)

f - Вариационный расчет [25]: 0.0492

$N_i=6$  и  $N_f=4$  силы осцилляторов  $f_L$  согласуются с прецизионными вариационными расчетами с точностью до нескольких десятитысячных а.е. Во всех наших расчетах значения  $f_A$  превышают  $f_L$ . Заметим, что в методе наложения конфигураций с учетом ~50 слэтеровских орбиталей [59] значения  $f_A$  меньше, чем  $f_L$ , но приблизительно на ту же величину расхождения, что и в нашем расчете. Отметим также, что с ростом номера  $m$  для  $1^1S^e - m^1P^o$  переходов разность между  $f_L$  и  $f_A$  уменьшается. Это справедливо и для остальных  $n^1S^e - m^1P^o$ ,  $n=2,3$  и  $m=2,3,4$ ,

Таблица 4. Значения сил осцилляторов в форме длины (ускорения) для переходов  $1s3s(^1S^e) - 1smp(^1P^o)$ ,  $m=2,3,4$ , в гелии в зависимости от числа радиальных уравнений  $N_i$  и  $N_f$ . Для сравнения приведены результаты вычислений в HSA-приближении и вариационным методом

$N_f \backslash N_i$	1	2	3	6
<u><math>1s3s(^1S^e) - 1s2p(^1P^o)</math></u>				
1	-0.1291(-0.6558) <sup>a</sup>	-0.1404(-0.5289)	-0.1637(-0.6102)	-0.1696(-0.5956)
2	-0.1173(-0.0460)	-0.1281(-0.0136)	-0.1503(-0.0360)	-0.1560(-0.0326)
3	-0.1113(-0.1265)	-0.1216(-0.0654)	-0.1434(-0.1011)	-0.1489(-0.0941)
4	-0.1081(-0.1260)	-0.1183(-0.0614)	-0.1397(-0.0776)	-0.1452(-0.0693) <sup>b</sup>
<u><math>1s3s(^1S^e) - 1s3p(^1P^o)</math></u>				
1	0.5429(137.86) <sup>c</sup>	0.6022(45.1873)	0.7015(36.079)	0.7304(24.7740)
2	0.4852(2.2012)	0.5451(27.2453)	0.6457(5.6094)	0.6751(8.0149)
3	0.4530(2.2471)	0.5134(33.8654)	0.6146(8.9367)	0.6443(12.3885)
4	0.4343(11.0143)	0.4947(5.5325)	0.5962(0.6264)	0.6262(2.4625) <sup>d</sup>
<u><math>1s3s(^1S^e) - 1s4p(^1P^o)</math></u>				
1	0.1832(1.1246) <sup>e</sup>	0.1571(0.4407)	0.1188(0.7176)	0.1052(0.5866)
2	0.2092(0.3356)	0.1811(0.0294)	0.1396(0.1809)	0.1247(0.1279)
3	0.2183(0.2443)	0.1896(0.0056)	0.1470(0.0986)	0.1316(0.0580)
4	0.2277(0.5242)	0.1983(0.0821)	0.1546(0.2450)	0.1389(0.1703) <sup>f</sup>

a - Гиперсферическое адиабатическое приближение [52]: -0.130(-0.579); b - Вариационный расчет [25]: -0.1455;

c - Гиперсферическое адиабатическое приближение [52]: 0.539(21.764); d - Вариационный расчет [25]: 0.6262; e - Гиперсферическое адиабатическое приближение [52]: 0.178(0.376); f - Вариационный расчет [25]: 0.1439



Таблица 5. Сравнение сил осцилляторов, вычисленных в данной работе в многоканальном HSA-приближении (6 каналов для  $1s^e$  и 4 канала для  $1p^o$  состояний), с результатами аналогичных расчетов другими методами

Переход	Green et al. [59]	Fischer [17]	Devine and Stewart [31]	Davies and Chang [33]	Shiff et al [32]	Kono and Hattori [25]	Данный расчет
$1^1s - 2^1p$	0.2754	0.2753	0.2760	0.2721	0.2762	0.2762	0.2763
$1^1s - 3^1p$	0.0729		0.0734		0.073	0.0734	0.0728
$1^1s - 4^1p$	0.0296				0.030	0.0299	0.0297
$2^1s - 2^1p$	0.3773	0.3771	0.3764	0.3761	0.3764	0.3764	0.3773
$2^1s - 3^1p$	0.1513		0.1515		0.1514	0.1513	0.1488
$2^1s - 4^1p$	0.0493				0.049	0.0492	0.0482
$3^1s - 2^1p$	-0.1457		-0.1456		-0.1454	-0.1455	-0.1452
$3^1s - 3^1p$	0.6279		0.6264		0.626	0.6262	0.6261
$3^1s - 4^1p$	0.1429				0.144	0.1439	0.1389

переходов (см. таблицы 3 и 4), хотя сами значения  $f_A$  для этих переходов значительно уступают в точности  $f_L$ . Это связано с наличием в выражении для  $f_A$  фактора  $(E_f - E_i)^{-3}$ , весьма чувствительного к точности вычисления энергий  $E_i$  и  $E_f$ . Анализ таблиц 3 и 4 показывает, что в целом для  $n^1s^e - m^1p^o, n=2,3$  и  $m=2,3,4$ , переходов сохраняется та же картина сходимости, что и для переходов из основного состояния, за исключением  $2^1s^e - 2^1p^o$  и  $3^1s^e - 3^1p^o$  переходов, для которых  $f_L$  сходится к "точным" значениям снизу. Заметим, что учет неадиабатических поправок ( $N_i=6, N_f=4$ ) позволяет повысить точность вычисления  $f_L$  по сравнению с адиабатическим приближением по крайней мере на порядок. Сравнение выполненных расчетов с результатами вычислений сил осцилляторов другими методами, приведенными в таблице 5, показывает, что многоканальное приближение HSA-подхода сравнимо по точности с большинством широко используемых в атомных расчетах методов и уступает только вариационным расчетам, выполненным с учетом значительно большего числа состояний. Это обстоятельство является хорошей предпосылкой для широкого применения многоканального HSA-подхода в расчетах спектральных характеристик атомных систем. Интересно изучить возможности использования HSA-подхода для многоканальных расчетов сечений фотоионизации гелиеподобных систем, а также сечений возбуждения одноэлектронных атомов и ионов электронным ударом. Кроме того, важно исследовать влияние неадиабатических поправок на ширины автоионизационных состояний двухэлектронных систем. Указанный круг вопросов является предметом дальнейших исследований.

Л и т е р а т у р а

1. K.Smith, Repts Progr. Phys. 29(1966)373;
2. P.G.Burke, Adv. Atom. Mol. Phys. 4(1968)173.
3. G.J.Schulz, Rev. Mod. Phys. 45(1974)378.
4. P.G.Burke, W.D.Robb, Adv. Atom. Mol. Phys. 11(1975)143.
5. J.Callaway, Phys.Repts. 45(1978)89.
6. D.E.Golden, Adv. Atom. Mol. Phys. 14(1978)1
7. J.Callaway, Adv. Phys. 29(1980)771.
8. J.Callaway, Comm. Atom. Mol. Phys. 10(1981)279.
9. D.R.Herrick, Adv. Chem. Phys. 52(1983)1.
10. Y.K.Ho, Phys.Repts. 99(1983)1.
11. U.Fano, Rep.Progr.Phys. 46(1983)97.
12. U.Fano, A.R.P. Rau, Atomic Collisions and Spectra (Wiley, New York, 1985).
13. C.D.Lin, Adv. Atom. Mol. Phys. 22(1986)77.
14. K.Smith, The Calculation of Atomic Collision Processes (Wiley, New York, 1971).
15. В.П.Жигунов, Б.Н.Захарьев. Методы сильной связи каналов в квантовой теории рассеяния (Атомиздат, Москва, 1974).
16. L.Lipsky and A.Russek, Phys.Rev. 142(1966)59.
17. C.Froese-Fischer, The Hartree-Fock method for Atoms. A numerical approach (Wiley, New York, 1977).
18. E.A.Hylleraas and J.Mittdal, Phys.Rev. 103(1956)829.
19. T.Kinoshita, Phys.Rev. 105(1957)1490.
20. C.L.Pekeris, Phys.Rev. 112(1958)1649; 115(1959)1216; 126(1962)1470.
21. C.Schwartz, Phys.Rev. 128(1962)1146.
22. K.Frankowski, C.L.Pekeris, Phys. Rev. 146(1966)46; 150(1966)366.
23. A.J.Thakkar, V.H.Smith, Jr. Phys.Rev.A 15(1977)1; 16.
24. D.E.Freund, B.D.Huxtable, J.D.Morgan, Phys.Rev. A29(1984)980.
25. A.Kono and S.Hattori, Phys.Rev. A29(1984)2981.
26. I.L.Hawk, D.L.Hardcastle, Comput.Phys.Commun. 16(1979)159.
27. F.S.Levin, J.Schertzer, Phys.Rev.A 32(1985)3285.
28. L.C.Green, E.K.Kolchin and N.C.Johnson, Phys.Rev. 139(1965)373.
29. L.Lipsky, R.Anania, M.J.Conneely, Atom. Data Nucl. Data Tables 20(1977)127.
30. K.R.Devine and A.L.Stewart, J.Phys. B5(1972)432.
31. K.R.Devine and A.L.Stewart, J.Phys. B5(1972)2182.
32. B.Schiff, C.L.Pekeris and Y.Accad, Phys.Rev.A 4(1971)885.

33. B.F.Davies and K.T.Chung, Phys.Rev. A 25(1982)1328.
34. B.Klahn, J.D.Morgan, J.Chem.Phys. 81(1984)410.
35. В.А.Фок. Изв. АН СССР, сер. физ. 18(1954) 161.
36. P.M.Morse and H.Feshbach, Methods of Theoretical Physics (New York: McGraw-Hill, 1953).
37. L.M.Delves, Nucl.Phys. 9(1959)391; 20(1960)275.
38. S.V.Petrov, S.S.Jarovoy and Yu.A.Babaev, J.Phys. B 20(1987)4679.
39. C.G.Bao, Phys.Rev. A 38(1988)591.
40. D.Cordes and P.L.Altick, Phys.Rev. A 38(1988)5479.
41. M.I.Haftel and V.B.Mandelzweig, Phys.Rev. A 38(1988)5995.
42. J.H.Macek, J.Phys. B 1(1968)831.
43. C.H.Greene, Phys.Rev.A 23(1981)661.
44. J.E.Hornos, S.W.McDowell, C.D.Caldwell, Phys.Rev.A 33(1986)2212.
45. J.C.Frey, B.J.Howard, Chem.Phys. 111(1987)33.
46. A.G.Abrashkevich et al, Phys. Lett. A 133(1988)140.
47. А.Г.Абрашкевич и др. Препринт ОИЯИ Р4-88-640, Дубна, 1988.
48. А.Г.Абрашкевич, С.И.Виницкий, М.С.Касчиев, И.В.Пузынин. ЯФ 48(1988)945.
49. F.T.Smith, Phys.Rev.Lett. 45(1980)1157.
50. А.Г.Абрашкевич, Д.Г.Абрашкевич, С.И.Виницкий, И.В.Пузынин. Препринт ОИЯИ Р4-89-311, Дубна, 1989.
51. D.L.Miller, A.F.Starace, J.Phys. B 13(1980)L525.
52. C.-H.Park, A.F.Starace, J.Tan, C.D.Lin, Phys.Rev. A 33(1986)1000.
53. M.Fink, P.Zoller, J.Phys. B 18(1985)L373.
54. А.Г.Абрашкевич, М.С.Касчиев, И.В.Пузынин. Препринт ОИЯИ Р11-88-744, Дубна, 1988.
55. А.Г.Абрашкевич и др. Препринт ОИЯИ Р11-88-745, Дубна, 1988.
56. C.F.Fischer, J.Comput. Phys. 13(1973)502.
57. C.E.Moore, Atomic Energy Levels, Natl.Bur.Stand.(U.S.). Natl. Stand.Data Ser. No. 35 (U.S. GPO, Washington, D.C., 1971), Vol.1.
58. C.H.Park and A.F.Starace, Phys.Rev. A 29(1984)442.
59. L.C.Green, N.C.Johnson and E.K.Kolchin, Astrophys. J. 144(1966)369.

Рукопись поступила в издательский отдел  
13 июня 1989 года.

Абрашкевич А.Г. и др.

P4-89-426

Расчет дипольных сил осцилляторов для дискретных  $1S^e - 1P^o$  переходов в гелии в многоканальном гиперсферическом адиабатическом подходе

Впервые в адиабатическом гиперсферическом подходе вычислены дипольные матричные элементы и силы осцилляторов для дискретных  $1S^e - 1P^o$  переходов в гелии с учетом неадиабатической связи каналов. Численно исследована зависимость значений уровней энергии основного и однократно возбужденных состояний и сил осцилляторов от числа каналов. Получено хорошее согласие с результатами аналогичных вычислений другими методами.

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.

P4-89-426

Multichannel Calculation of the Electric-Dipole Oscillator Strengths for the Discrete  $1S^e - 1P^o$  Transitions in Helium within the Hyperspherical Adiabatic Approach

For the first time the electric-dipole matrix elements and oscillator strengths for the discrete  $1S^e - 1P^o$  transitions in helium are calculated with taking into account the nonadiabatic channel coupling. Dependence of the energy values for the ground and single excited states and oscillator strengths on the number of channels is investigated. The good agreement with the results of similar calculations by different methods is obtained.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1989